

Telítetlen közegben történő szivárgás és anyagtranszport numerikus vizsgálata

T037667 OTKA kutatás szakmai zárójelentése

1. A víz porózus közegbeli mozgásának törvényszerűségei

1.1. Elméleti alapok, a szivárgás alapegyenlete

A hidrodinamikai modellezés során a vízmozgás alapegyenletének megoldását keressük permanens és nem permanens állapotban, illetve telített vagy telítetlen közegben, ezért a megoldási lehetőségek ismertetését megelőzően bemutatjuk a szivárgás alapegyenletének alakjait, a Laplace- és Richards-egyenleteket. A szivárgás alapegyenletének levezetését az ismert felszín alatti szivárgásokkal foglalkozó hidraulika könyvek (BEAR-VERRUIJT, 1987; KINZELBACH, 1986; FREEZE-CHERRY, 1979) részletesen ismertetik.

A szivárgás alapegyenlete matematikai formában írja le a vízmozgás törvényszerűségeit. *A szivárgást leíró alapvető összefüggés a Darcy-törvény; ezt a porózus közegben áramló folyadékok tömegmegmaradásának kontinuitási egyenletével összeillesztve a szivárgás alapegyenletét kapjuk meg.*

Az eredményként kapott parciális differenciál-egyenlet egymástól alig eltérő formában írható fel a permanens és nem permanens, telített közegbeli áramlás esetére, sőt kiterjeszthető a telítetlen közegbeli szivárgásokra is. Mindhárom esetre vonatkozóan megállapítható, hogy a kapott parciális differenciálegyenlet a matematikusok számára nagyon ismert, ezért megoldásukra vonatkozóan számos eljárást dolgoztak ki.

1.1.1. Telített közegbeli permanens szivárgás

Telített közegben a permanens vízmozgást – mellőzve a levezetést - az alábbi egyenlet írja le:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = 0. \quad (2.1.)$$

Ez az egyenlet a matematikában jól ismert *Laplace-egyenlet, melynek megoldása mutatja meg a h piezometrikus szint nagyságát bárhol egy háromdimenziós áramlási térben.* Kétdimenziós esetben a Laplace-egyenlet megfelelő tagja kiesik, így kapjuk a nyomás-szint eloszlást a vizsgált sík mentén.

Amennyiben a közeg anizotróp, akkor a szivárgási tényező vektor k_x , k_y és k_z komponensei nem egyenlők és ekkor a szivárgás alapegyenlete anizotróp, porózus, telített közeg esetére permanens állapotot feltételezve:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) = 0, \quad (2.2.)$$

ahol k_x , k_y és k_z a szivárgási tényező tenzor főátlójának elemei.

1.1.2. Telített közegbeli nem permanens szivárgás

A nem-permanens szivárgás telített közegbeli alapegyenlete:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) = \rho S_s \frac{\partial h}{\partial t}, \quad (2.3.)$$

ahol ρ a folyadék sűrűsége, S_s a fajlagos tárolási tényező. *A fajlagos tárolási tényező az egységnyi nyomásszint-változás hatására a közet kompressziója miatt, illetve a víz tágulása miatt felszabaduló vízmennyiség összege, azaz*

$$S_s = \rho g (\alpha + n\beta), \quad (2.4.)$$

ahol α a közet, β a folyadék kompresszibilitása és n a hézagtérfogat. A fajlagos tárolási tényező dimenziója $[1/L]$, általában $1/m$ az SI rendszerben.

Egy m vastagságú telített rétegben (zárt tükrű vízádó) a *transzmisszivitás* $T=km$ és a *tárolási tényező* definíciószerűen $S=S_s m$:

$$S = S_s m = \rho g m (\alpha + n\beta) \quad (2.5.)$$

A tárolási tényező egy zárttükrű vízádóban megmutatja, hogy mekkora vízmennyiség szabadul fel egy egységnyi felületű részén a vízádónak, miközben a nyomásszint egységnyit csökken. A tárolási tényező dimenzió nélküli szám, nagysága a 0,005-0,00005 intervallumban szokott változni. SZÉKELY F. (1986) szerint az Alföldön a tárolási tényező nagysága 0,001 körüli. A tárolási tényező vízrekesztő képződményekre is definiálható, azonban ebben az esetben az $n\beta$ tag elhanyagolható nagyságú.

Amennyiben a közeg izotróp és homogén, akkor a matematikában diffúzió-egyenletként ismert formulát kapjuk:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = \frac{S_s}{k} \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\rho g (\alpha + n\beta)}{k} \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2.6.)$$

Az áramlási térben tehát a nyomásszintek változása a térben és az időben a k szivárgási tényező, α közeg összenyomhatóság és n hézagterfogat, mint közegjellemzőtől, és a folyadék β összenyomhatóságától és ρ sűrűségétől függ.

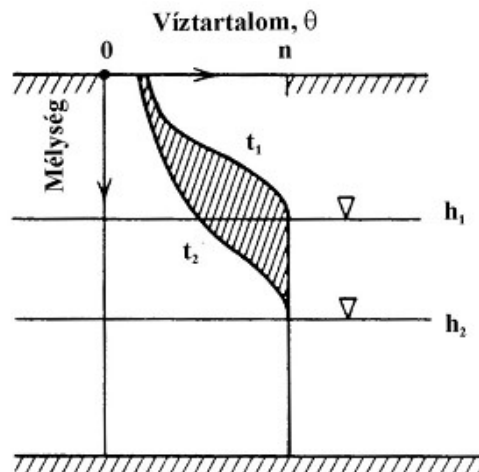
Amennyiben egy m vastagságú horizontális vízádot tekintünk, akkor a tárolási tényező $S = m \cdot S_s$, illetve a transzmisszivitás $T = k \cdot m$ és ekkor

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} = \frac{S}{T} \frac{\partial h}{\partial t}, \quad (2.7.)$$

ami a Theis-Jacob-féle analitikus megoldás kiinduló összefüggése. Az egyenlettel számítható a x , y síkbeli koordináták függvényében a piezometrikus szint, amennyiben a vízádot T transzmisszivitása és S tárolási tényezője ismert.

A nyílt tükrű rendszerben a víztárolási képességet a *fajlagos hozam* jellemezhetjük. *A fajlagos hozam az a vízmennyiség, amennyi felszabadul egy egységnyi felületű, nyílt tükrű vízádóból miközben a nyomásszint egységnyi csökken.* A 1. ábra a víztartalom változását mutatja két időpontban (t_1 és t_2) a mélység függvényében. Az ábrán sraffozással jelölt, a görbék közötti terület nagysága arányos a felszabaduló vízmennyiséggel. Amennyiben a nyomásszint-változás éppen egységnyi, akkor a sraffozott terület éppen a fajlagos hozamnak megfelelő nagyságú. Amennyiben a telítetlen zónában tárolt vízmennyiségeket elhanyagoljuk, akkor a fajlagos hozam értéke megegyezik a szabad hézagterfogat értékével.

A fajlagos hozam S_y értéke általában 0,01-0,3 közötti. A nagyobb értékek azt jelzik, hogy a pórusok nagy része leürül a nyomásváltozások hatására, a maximális vízkapacitás, azaz a vízmennyiség, amit a közet a gravitációs erő ellenében magában tartani képes, kicsi.



1. ábra

A fajlagos hozam értelmezése

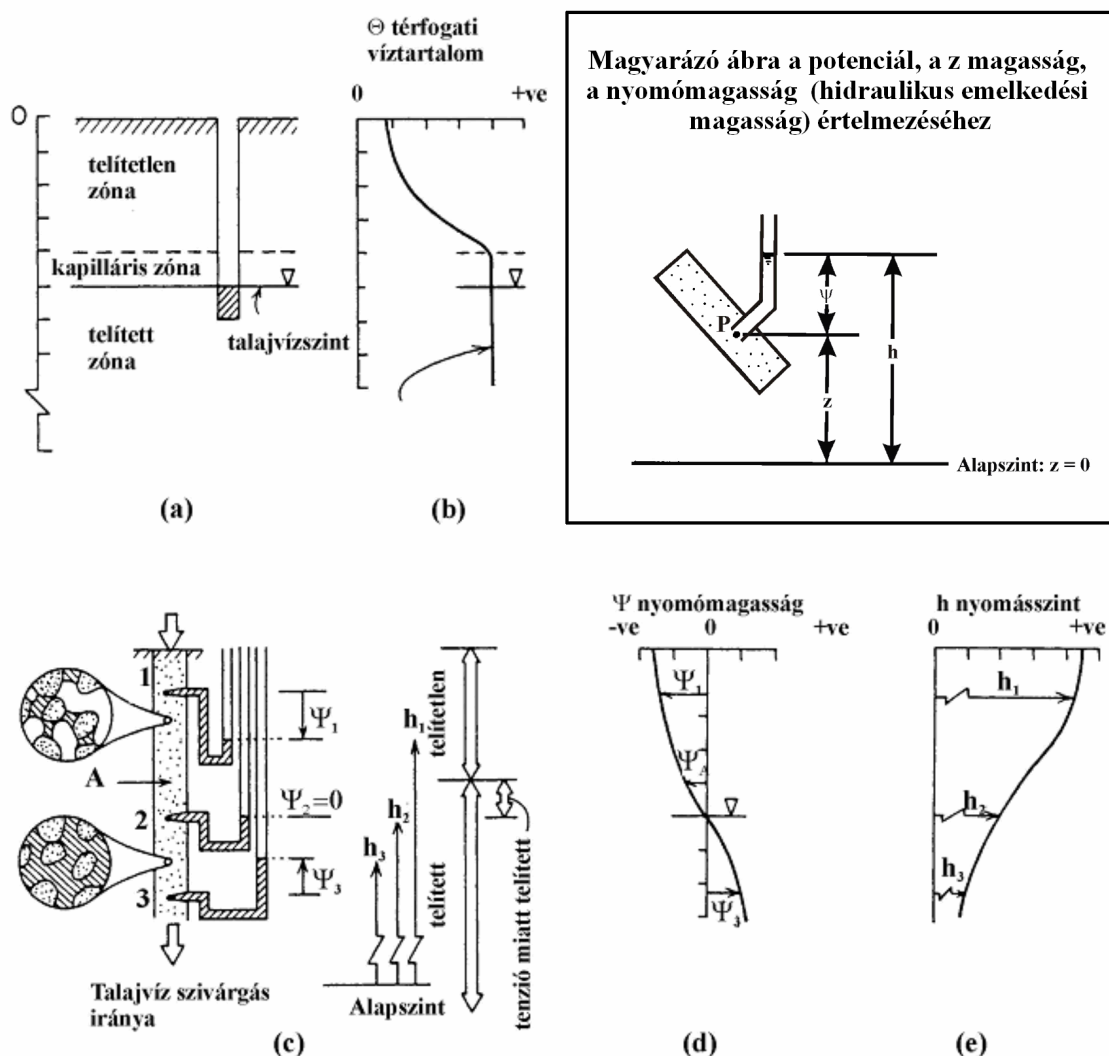
1.1.3. Nem permanens szivárgás telítetlen közegben

A *telítettséget* tekintjük a $\Theta' = \Theta / n$ alakban, ahol Θ a térfogati víztartalom és n a hézagterfogat. Következésképpen a telítettség akkor 100%, amikor a térfogati víztartalom és a hézagterfogat értéke azonos. Tekintsünk egy függélyt a felszíntől a talajvízig. A felszínen és közelében telítetlen a közeg, a talajvízszint közelében telített. Bár egyszerűsítve a telített és telítetlen közeg határát a talajvízszint magasságában tételezhetnénk fel, ez nem igaz, mert a talajvíz felett a kapilláris zóna található. A talajvízszint mélységében a pórufolyadék p nyomásszintje pontosan megegyezik a légköri nyomással ezért a ψ nyomómagasság zérus. A talajvízszint alatt az értelmezés szerint $\psi > 0$, ezért logikusan a talajvízszint felett $\psi < 0$, ha $h = z + \psi$ (2. ábra). Telítetlen közegben a víz a talaj pórusaiban felületi feszültség miatt fellépő erők hatása alatt áll és az emiatt fellépő negatív nyomómagasságot szívómagasságnak vagy tenzióknak szokták nevezni.

A telítetlen zónában mind a Θ térfogati víztartalom, mind a k szivárgási tényező a ψ nyomómagasság függvénye. Mint azt kísérletek bizonyították a térfogati víztartalom-nyomómagasság összefüggésnek alakja eltérő nedvesedés és száradás folyamán, azaz a görbének hisztérézise van (3. ábra:a). Mint ahogy az ábráról látható, a

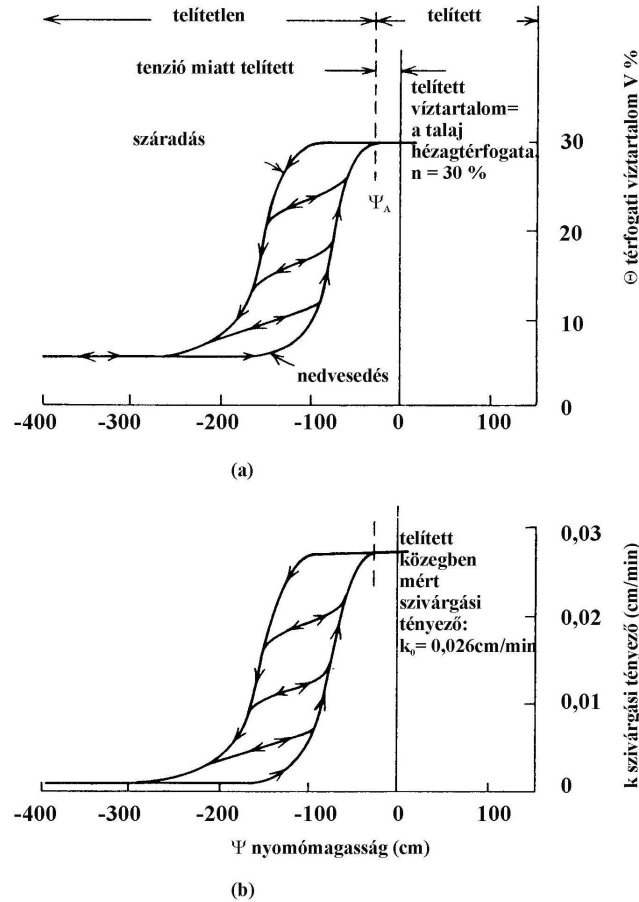
Θ térfogati víztartalom nemcsak a telített közegben ($\psi \geq 0$), hanem a telített állapothoz közeli, kis negatív nyomómagasságok, tenziók tartományában is megegyezik a hézagtérfogattal. Ez a tartomány finom szemcsés képződményeknél nagyobb, durva szemcsés anyagoknál gyakorlatilag nem létezik. Azt a ψ_a tenzió-értéket, ahol a térfogati víztartalom csökkenni kezd levegő-belépési nyomómagasságnak, a p_a nyomásszintet levegő-belépési vagy másképpen buborék nyomásnak nevezik. A térfogati víztartalomhoz hasonlóan a szivárgási tényezők negatív nyomómagasság függésének is hiszterézise van. A $\psi \geq \psi_a$ tartományban $k=k_0$, ahol k_0 a telített közeg szivárgási tényezője. Mivel a k szivárgási tényező a ψ nyomómagasság függvénye és ugyanakkor a Θ térfogati víztartalom is függvénye a ψ nyomómagasságnak, ebből következik hogy a szivárgási tényező egyben a térfogati víztartalom, illetve a telítettségnek is a függvénye, azaz a szivárgási tényező növekszik a telítettséggel (3. ábra:b) Telítetlen közegben a víz mozgását az ábrán látható karakterisztikus görbék, azaz a $k=k(\psi)$ és a $\Theta=\Theta(\psi)$ görbék határozzák meg, ezért ezeket a telítetlen közegben végbemenő vízmozgás karakterisztikus görbéinek is szokták nevezni. A karakterisztikus görbe meredeksége a telítetlen közeg tárolási jellemzője, amit *c fajlagos talajnedvesség kapacitás*nak neveznek:

$$c = \frac{d\Theta}{d\psi} \quad (2.8.)$$



2. ábra

A talajvíz állapota a felszín közelében
(FREEZE – CHERRY, 1979)



3. ábra

A telítetlen közegbeli vízmozgás karakterisztikus görbéi
(FREEZE – CHERRY, 1979)

Tekintettel arra, hogy a karakterisztikus görbe nem lineáris és hiszterézise is van, ugyanez mondható el a fajlagos talajnedvesség-kapacitásról is. Amennyiben a nyomómagasság nagyobb, mint ψ_a , akkor $c=0$, azaz további víz nem tárolódik, mert a közeg telítetté vált.

A karakterisztikus görbék alakja a porózus közeg szemmagyságától jellegzetesen függ. A 4. ábra néhány képződmény összehasonlító karakterisztikus görbéit mutatja be a hiszterézist figyelmen kívül hagyva.

A Darcy- törvényt telítetlen közegekre vonatkozóan az alábbi formában írhatjuk fel:

$$v = -k(\psi) \cdot \nabla h \quad (2.9.)$$

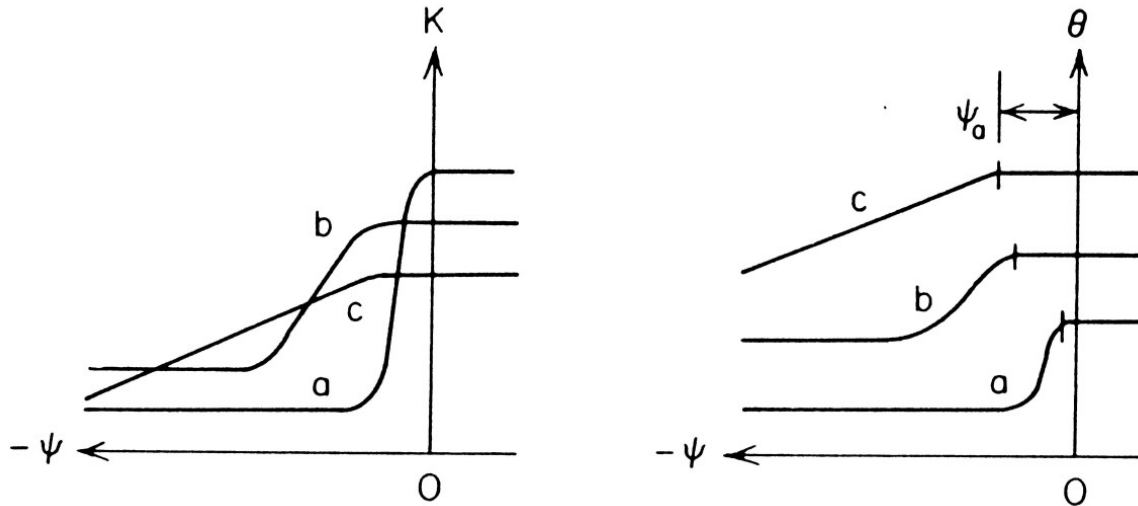
A szivárgás alapegyenletének szokásos formája telítetlen közeg esetére:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k(\psi) \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k(\psi) \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k(\psi) \frac{\partial h}{\partial z} \right) = \frac{\partial \Theta}{\partial t} \quad (2.10.)$$

Az (1.10.) egyenletet olyan formára is szokás hozni, hogy a független változó a Θ térfogati víztartalom helyett a ψ nyomómagasság, ehhez vegyük figyelembe, hogy a térfogati víztartalom időbeli változása a nyomómagasság

változásán keresztül megy végbe, azaz $\frac{\partial \Theta}{\partial t} = \frac{\partial \Theta}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t}$, majd használjuk a c fajlagos talajnedvesség-

kapacitás definícióját, valamint, hogy $h=z+\psi$:



4. ábra

Homok (a), iszapos homok (b) és iszapos agyag (c) jellemző karakterisztikus görbéje (FREEZE – CHERRY, 1979)

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left[k(\psi) \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} + 1 \right) \right] = c(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (2.11.)$$

A (1.11.) egyenlet a talajfizikában igen gyakran használt Richards-egyenlet amely meghatározza a ψ nyomómagasságokat a telítetlen áramlási tér bármely pontjában egy adott időpontban. A megoldás a $k=k(\psi)$ és a $C=C(\psi)$ vagy $\Theta=\Theta(\psi)$ karakterisztikus görbék ismeretét kívánja meg.

1.2. A szivárgás alapegyenletének megoldási módjai

A szivárgás alapegyenletét mind analitikus, mind numerikus úton meg lehet oldani. Az analitikus megoldásokat az egyenlet integrálással való megoldásával kapjuk meg. Az integrálás csak néhány esetben és kizárólag úgy oldható meg, ha néhány közegjellemzőt vagy egyéb paramétert a teljes rendszerben állandónak tekintünk és kihasználjuk a megoldandó probléma speciális tulajdonságait, pl. hengerszimmetriáját vagy végtelen hosszúnak tételezzük fel a vizsgált létesítményt. Az analitikus megoldás eredménye matematikailag általában egzakt, ritkább esetben közelítő, pl. sorba fejtéses megoldás. Az analitikus megoldások jellemzője, hogy az eredményt egy explicit összefüggéssel meghatározható.

A numerikus megoldások a szivárgás alapegyenletének közelítő megoldásai. A közelítő megoldást matematikai értelemben kell érteni, azaz hogy a megoldás nem egzakt. Ha a megoldás közelítő, akkor hibákkal terhelt, amelyeket numerikus hibáknak hívunk.

A numerikus megoldások úgy közelítik a valós folyamatokat, hogy mind időben, mind térben szakaszolják a lezajló folyamatokat. Az egyes szakaszokon belül a számítható szükséges paramétereket állandónak tekintik, és ezzel válik lehetővé a megoldás.

A térbeli szakaszolás alatt a numerikus módszerek alkalmazásánál az elemekre bontást értjük. A vizsgált térrészt olyan elemekre bontjuk melyeken belül az egyes közegjellemzők (pl. szivárgási tényező, transzmisszivitás, szabad hézagtérfogat, tárolási tényező, stb.) állandónak tekinthető.

Az időbeli szakaszolást időlépcsőkre bontással oldjuk meg. Az időben történő változásokat olyan egységekre bontjuk, melyek alatt az időben változó tényezők (pl. a kutak hozama) állandónak, ritkább esetben lineárisan változónak tekinthetők.

Mind az elemek, mind az időlépcsők száma elvileg korlátlan, így a szakaszolás mind térben, mind időben tetszőleges. Minél több elemre vagy időlépcsőre bontjuk a vizsgált folyamatot, annál pontosabban tudjuk a tér-, illetve időbeli változásokat követni. Tudni kell azonban, hogy a tér és időbeli szakaszolás növelésével egyes numerikus hibák is nőnek és a probléma számításigénye is exponenciálisan növekszik. Éppen ezért a feladat tér- és időbeli szakaszolásának van egy optimuma, ahol a numerikus módszerrel közelített probléma már megfelelő mértékben követi a valós folyamatokat az időben és a térben, ugyanakkor a számítási igénye és különösképpen a numerikus hibák nagysága még elhanyagolható.

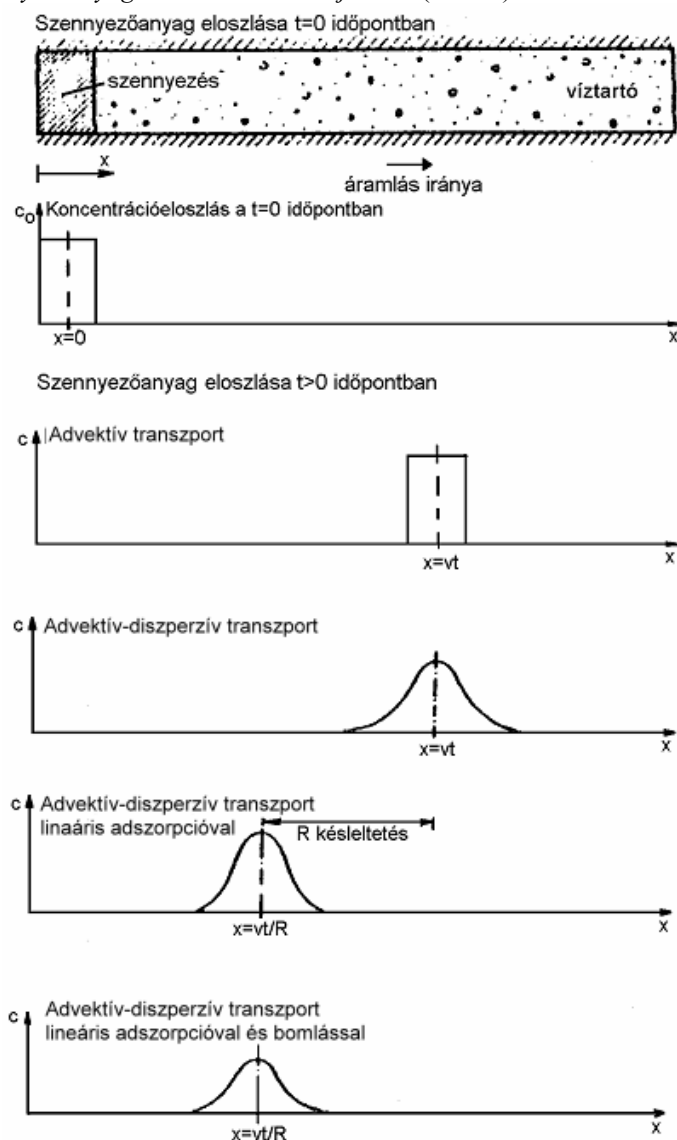
A víz porózus közegbeli szivárgásának jellemzőit a következő numerikus módszerekkel lehet vizsgálni:

- véges differencia módszer
- véges elem módszer
- peremelem módszer
- analitikus elemek módszere

2. A szennyezőanyagok terjedésének törvényszerűségei porózus közegben

2.1. A transport-folyamatok és a transportegyenlet

A vízben oldható szennyezőanyagok terjedését két alapvető folyamat határozza meg: egyfelől az *advekcio* (konvekció), amely a fizikailag vagy kémiaiag oldott anyagok pórusokban való tömeges áramlását; másfelől a *diszperzió*, amely a szennyezőanyag térbeli szóródását jelenti. (5. ábra)



5. ábra

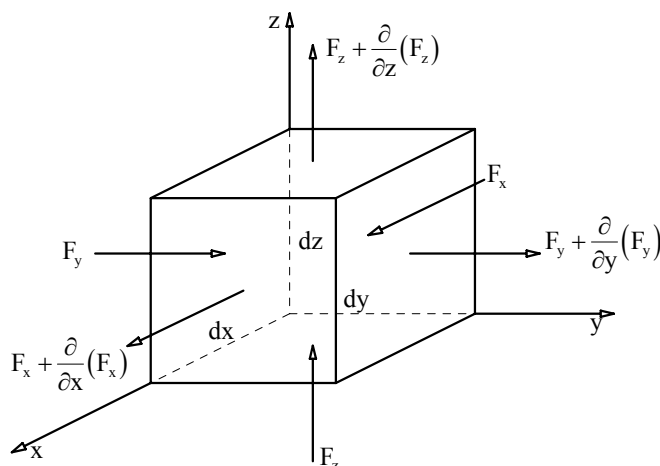
A transportfolyamatok jellegzetes elemei
(KINZELBACH, 1986)

A szóródást kémiai illetve fizikai folyamatok okozhatják. Eredete részben a diffúzióra, amely a különböző koncentrációjú oldatok között a részecskének a koncentráció-különbség kiegyenlítődéig tartó mozgása, részben a szivárgási sebesség lokális eltérései következtében kialakuló mechanikai diszperzióra vezethető vissza. A két alapvető folyamaton kívül további fizikai és kémiai folyamatok az oldat áramlásának késleltetéséhez, valamint a szennyezőanyag lebomlásához, degradációjához vezethetnek (TAMÁS et. al. 2002).

2.1.1. A kémiai anyagmérleg

Tekintsük a porózus közeg egy elemi kockáját x , y , z koordináta-rendszerben úgy, hogy annak oldalai merőlegesek a koordináta tengelyekre. Legyenek a térbeli szennyezőanyag-áramot leíró fluxus-vektor komponensei F_x , F_y és F_z . A kémiai anyagmérleget figyelembe véve az elemi kockában tárolt anyagmennyiség időbeli megváltozásának egyenlőnek kell lennie az elemi kockába - időegység alatt - be- és kilépő fluxusok előjeles összegével. Az elemi kockában tárolt anyagmennyiség változása a belépő és kilépő fluxusok különbsége, azaz (6. ábra):

$$\frac{dM}{dt} = \frac{\partial}{\partial x}(F_x)dydz + \frac{\partial}{\partial y}(F_y)dxdz + \frac{\partial}{\partial z}(F_z)dxdy \quad (2.1.)$$



6. ábra

Az elemi térrész szennyezőanyag-mérlege

2.1.2. A transzportfolyamat elemei

Porózus közegben a kémiai anyagáramlás fő komponensei az advektív anyagáramok, valamint a diffúzió és a mechanikai diszperzió következtében kialakuló anyagtranszport. Az oldott fázisban maradó anyag mennyiségét ezen felül még további folyamatok, a felületi adszorpció és a kémiai vagy radioaktív bomlás befolyásolja.

A valós anyagmérleget tovább módosíthatják a reverzibilis és irreverzibilis kémiai folyamatok következtében mobilizálódó vagy leköttető anyagmennyiségek, amelyeket napjaink transzport-modelljei általában figyelmen kívül hagynak, mivel ezeknek a jelenségeknek a számításokkal való követése bonyolult és a hidraulikai eseményekkel közvetlen kapcsolatban sincsenek. A kémiai folyamatok pontos követésére a nemzetközi szakirodalomban csupán néhány próbálkozás található, ezek elsősorban egydimenziós transzportmodellek, melyek homogén áramlási teret tételeznek fel.

2.1.2.1. Az advektív (konvektív) anyagáramok

Az oldott anyagok vízzel való együttes tömeges áramlását advекciónak, illetve a hőtől kissé helytelenül átvéve konvekciónak nevezzük. (konvekció: hőmérsékleti különbségek hatására létrejövő mozgási folyamat; advекció: a potenciális (és a hőt kizáró) erőter által létrejött mozgási folyamat (MÁRKOS, 1987)). Az advektív szennyezőanyag-áram a közegbeli v átlagos áramlási sebesség és a C koncentráció szorzata, azaz:

$$F_{x,konv.} = \frac{dM_{x1}}{dydzdt} = v_x C, \quad F_{y,konv.} = \frac{dM_{y1}}{dxdzdt} = v_y C, \quad F_{z,konv.} = \frac{dM_{z1}}{dxdydt} = v_z C, \quad (2.2.)$$

ahol M a szennyezőanyag kémiai mennyisége és t az eltelt idő.

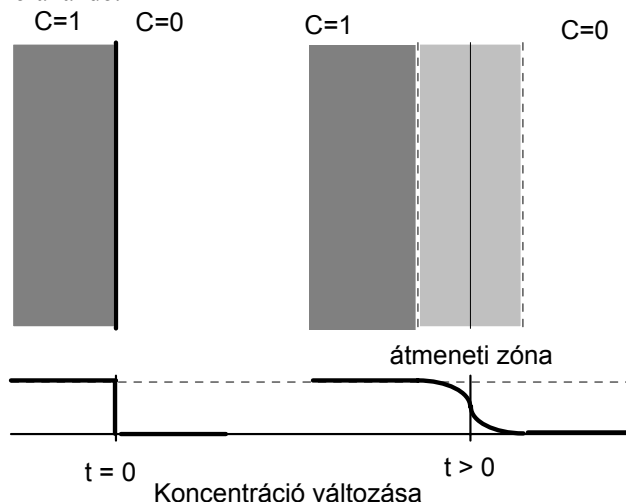
2.1.2.2. A diffúzió

A térbeli kémiai potenciál-különbségek hatására létrejövő tömegáramot, melyet a Fick I. törvénye ír le, diffúciónak nevezzük. A koncentráció-különbségek hatására létrejövő diffúziót közönséges diffúciónak (7. ábra), míg az elektromos potenciál- vagy hőmérséklet-különbségek okozta anyagáramokat kényszerdiffúciónak nevezzük (FILEP, 1988).

Fick I.-törvény értelmében a diffúzió által szállított kémiai anyagfluxus három komponense - porózus közegben - az alábbi formában írható fel:

$$F_{x,diff} = \frac{dM_{x2}}{dydzdt} = -D_{eff} \frac{\partial C}{\partial x}, \quad F_{y,diff} = \frac{dM_{y2}}{dxdzdt} = -D_{eff} \frac{\partial C}{\partial y}, \quad F_{z,diff} = \frac{dM_{z2}}{dxdydt} = -D_{eff} \frac{\partial C}{\partial z}, \quad (2.3.)$$

ahol D_{eff} az effektív (vagy látszólagos) diffúzió-állandó, amelynek értéke porózus közegben kisebb, mint a D_0 vizes közegben mért diffúzió-állandó.



7. ábra

A közönséges diffúzió folyamata
(BEAR-VERRUIJT, 1987)

A vízben mért és a porózus közegbeli diffúzió-állandó közötti kapcsolatra számos empirikus összefüggést határoztak meg, melyeket a 2.1.táblázat mutat be.

2.1. táblázat

<i>Az effektív diffúzió-állandó meghatározása néhány szerző szerint</i> SHACKELFORD és DANIEL (1991) nyomán	
Képlet	Szerző
$D_{eff} = D_0 / \tau$	GILLHAM et al.(1984)
$D_{eff} = D_0 \cdot \alpha / \tau$	LI és GREGORY (1974)
$D_{eff} = D_0 \Theta / \tau$	BERNER (1971), DREVER (1982)
$D_{eff} = D_0 \Theta \alpha \gamma / \tau$	KEMPER et al.(1964), NYE (1979)
$D_{eff} = D_0 \gamma / \tau$	PORTER et al.(1960)
$D_{eff} = D_0 \Theta \alpha / \tau$	van SCHAIK és KEMPER (1966)
$D_{eff} = D_0 \cdot \frac{1}{\tau(1 + K_d)}$	FILEP (1988) FRIED és COMBARNOUS (1971) alapján
$D_{eff} = D_0 \cdot \frac{\Theta}{\tau^2} = D_0 \cdot \frac{1}{F}$	A tárolómérnöki gyakorlatban alkalmazott formula, ahol F a formációs ellenállási tényező

ahol:

D_0 a vizes oldatban mért diffúzió-állandó

θ a víztartalom térfogat %-ban, a fázisos összetétel v jelzőszáma

τ a tortuozitás (labirintus-faktor, tekervényesség)

γ a negatív adszorpciók szorzótényező (≤ 1)

α a viszkozitási faktor (≤ 1)

K_d a megoszlási együttható

Mint az látható, az effektív diffúzió-állandó egyenesen arányos a vizes oldatban mért diffúzió-állandóval és fordítottan a tortuozitással. A tortuozitás értéke porózus közegben általában 1,25 és 5 között változik a szemcseméret-eloszás és a szemcsék érintkezésének módja függvényében. Tömény oldatok, valamint viszkozus anyagok esetén az adszorpció mértékét meghatározó negatív adszorpciós tényező, valamint a viszkozitási faktor tovább csökkenti az effektív diffúzió-állandó értékét. A diffúzió állandónak a bemutatott táblázat szerinti számítása a felsorolt paraméterek meghatározási bizonytalanságai miatt nehézkes, ezért az effektív diffúzió állandót laboratóriumi kísérletek segítségével szokás meghatározni.

A D_0 értékét néhány ion híg vizes oldatára vonatkozóan, 25 °C hőmérsékleten, a 2.1. táblázat foglalja össze. Tekintettel arra, hogy a vizes oldatra vonatkozó diffúzió állandók kémiai kézikönyvekből kikereshetők, már egy komponensre meghatározva az effektív diffúzió állandót, az összes többi komponensre jó közelítéssel megkaphatjuk az effektív diffúzió állandót:

$$D_{eff}^{sp2} \cong \frac{D_{eff}^{sp1} \cdot D_0^{sp2}}{D_0^{sp1}} \quad (2.4.)$$

A diffúzió-állandó szigorú értelemben véve nem tekinthető állandónak, mivel értéke kis mértékben függ a koncentrációtól (SHAW, 1986) és erősen függ a hőmérséklettől is. Egyes laboratóriumi vizsgálatok szerint értéke 5°C-on akár felére is csökkenhet a 25 °C-on mért értékhez képest (ISTOK, 1989). FILEP (1988) szerint az ionok effektív diffúziós együtthatóját befolyásolja továbbá a közeg nedvességtartalma, illetve a közeg szerkezete, pórusméret-eloszlása (illetve az ezekről függő labirintus-hatás).

2.1.2.3. A hidrodinamikai (mechanikai) diszperzió

A hidrodinamikai diszperzió - egyes szerzők szerint mechanikai diszperzió - jelenségét az áramlási sebesség nagyságának és irányának lokális mikro-változásai okozzák a porózus közegen belül (8. ábra).

A hidrodinamikai diszperziót okozó legfontosabb hatások:

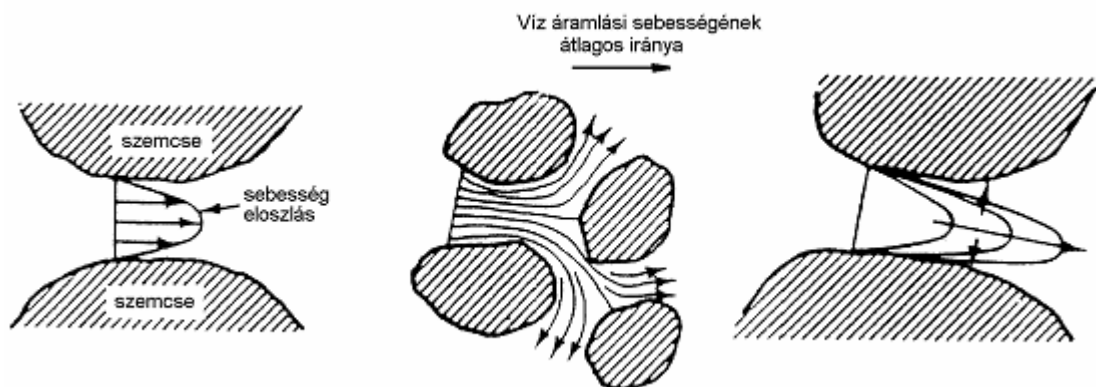
- a szivárgási sebesség nagyságának változása a pórusokon belül, mivel a szemcséket körülvevő kötött vízburok esetén a szivárgási sebesség zérus. és távolodva a szemcsétől a sebesség növekszik,
- a szivárgási sebesség irányainak változása, mivel a szivárgó folyadékban a szemcsék kikerülése miatt pontról pontra változik a szivárgási sebességvektor iránya,
- a pórusok méretváltozásai, mert az eltérő nagyságú (átmérőjű) pórusokban két különböző potenciállal jellemezhető pont között eltérő szivárgási sebességek alakulnak ki.

A hidrodinamikai diszperzió egy speciális esete az úgynevezett makrodiszperzió (9. ábra), amikor az egymástól eltérő vízföldtani tulajdonságokkal (szivárgási tényező, transzmisszivitás, szabad hézagterefogat stb.) jellemezhető földtani képződményekben kialakuló egymástól eltérő áramlási sebességek okozzák a szennyezőanyag szóródását, diszperzióját. Gyakorlati tapasztalatok szerint a makrodiszperzió abban az esetben válik dominánssá az egyéb mechanikai diszperziós folyamatok felett, amikor a modellezett területrészt horizontális kiterjedése meghaladja a 10÷50 métert.

Mind a hidrodinamikai (mechanikai), mind a makrodiszperzió következtében kialakuló szennyezőanyag-hozam – a jelenséget kiváltó okokból következően - arányos a pórusokra jellemző átlagos szivárgási sebességgel, tehát nagyobb pórusbéli szivárgási átlagsebesség mellett nagyobb lesz a szennyezőanyag szóródása is az említett transzport-folyamatok következtében. Ugyanez nem igaz ugyanakkor a diffúzió miatti anyagtranszportra, mert az teljesen hidraulikus gradiens, azaz szivárgási sebesség független, nagysága kizárólag a koncentráció-gradiens és az effektív diffúzió-állandó függvénye.

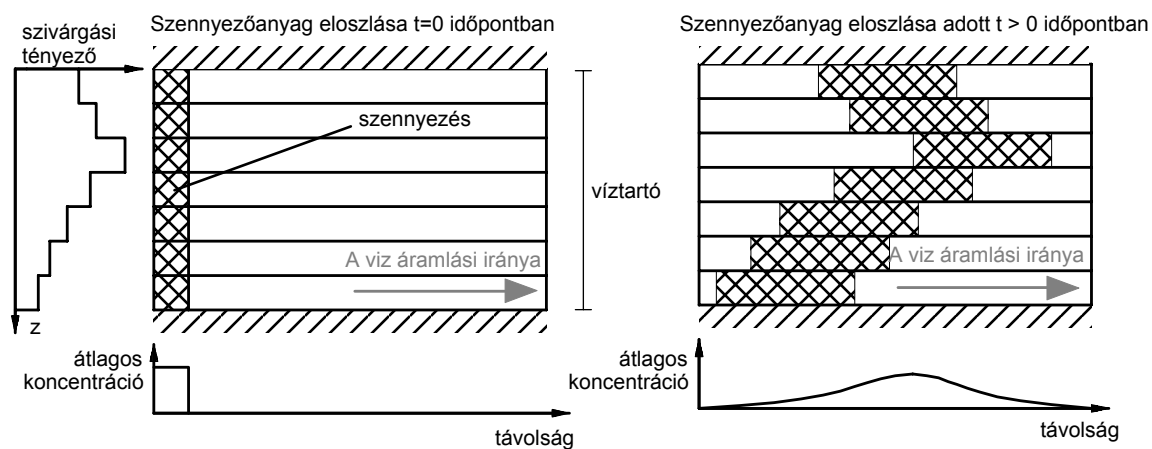
2.2. táblázat

Néhány ion vizes oldatban mért diffúzió-állandója 25 °C-on QUIGLEY és szerzőtársai (1987) LERMAN (1979) nyomán			
Kation	$D_0 \text{ (x } 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s)}$	Anion	$D_0 \text{ (x } 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s)}$
H	93,1	OH	52,7
Li	10,3	Cl	20,3
Na	13,3	HS	17,3
K	19,6	SO ₄	10,7
NH ₄	19,8	NO ₂	19,1
Mg	7,05	NO ₃	19,0
Ca	7,93	HCO ₃	11,8
Mn	6,88	CO ₃	9,55
Fe	7,19	PO ₄	6,12
Cu	7,33	CrO ₄	11,2
Zn	7,15		
Cd	7,17		
Pb	9,45		



8. ábra

A hidrodinamikai (mechanikai) diszperziót előidéző jelenségek
(BEAR-VERRUIJT, 1987)



9. ábra

Szennyezőanyag makrodiszperziójának kialakulása
(KINZELBACH, 1986)

Tekintettel arra, hogy a hidrodinamikai diszperzió (beleértve a makrodiszperziót is), illetve a diffúzió okozta koncentráció-eloszlás jellegében azonos, ezért a hidrodinamikai diszperzió következtében kialakuló anyagmozgást is – az analógiát felhasználva – Fick I. törvénye segítségével írhatjuk fel.

$$\begin{aligned} F_{x,Hidrodin.diszp.} &= \frac{dM_{x3}}{dydzdt} = -D_{xx} \frac{\partial}{\partial x}(\Theta C) - D_{xy} \frac{\partial}{\partial y}(\Theta C) - D_{xz} \frac{\partial}{\partial z}(\Theta C) \\ F_{y,Hidrodin.diszp.} &= \frac{dM_{y3}}{dxdzdt} = -D_{yx} \frac{\partial}{\partial x}(\Theta C) - D_{yy} \frac{\partial}{\partial y}(\Theta C) - D_{yz} \frac{\partial}{\partial z}(\Theta C), \quad (2.5.) \\ F_{z,Hidrodin.diszp.} &= \frac{dM_{z3}}{dxdydt} = -D_{zx} \frac{\partial}{\partial x}(\Theta C) - D_{zy} \frac{\partial}{\partial y}(\Theta C) - D_{zz} \frac{\partial}{\partial z}(\Theta C) \end{aligned}$$

ahol D_{xx} , D_{xy} , ..., D_{zz} a hidrodinamikai diszperzió-állandó. Tekintettel arra, hogy a (2.5.) szerinti diszperzív hozamok arányosak a pórusokban kialakuló átlagos szivárgási sebességgel, ezért a D_{xx} , D_{xy} , ..., D_{zz} hidrodinamikai diszperzió-állandóknak is arányosnak kell lenniük a pórusokban kialakuló átlagos szivárgási sebességgel. Az említett átlagos pórusbeli szivárgási sebességet a Darcy-törvényből meghatározott v_x , v_y és v_z sebességek felhasználásával számíthatjuk:

$$\bar{v}_x = \frac{v_x}{\Theta}, \quad \bar{v}_y = \frac{v_y}{\Theta}, \quad \bar{v}_z = \frac{v_z}{\Theta}, \quad (2.6.)$$

miel a Darcy által feltételezett teljes V térfogat helyett csak a $V_p = \Theta \cdot V$ pórustérfogaton keresztül történik a folyadék mozgása.

A szivárgási sebesség és a hidrodinamikai diszperzió-állandó közötti arányszámot diszperzivitásnak nevezzük. Tekintettel arra, hogy a diszperzió-állandó mértékegysége a Fick-törvény analógiájára $[L^2/T]$, a szivárgási sebessége $[L/T]$, ezért a diszperzivitás hosszúság $[L]$ dimenziójú. Mivel a szennyezőanyag hidrodinamikai és makrodiszperzió miatti szóródása eltér a szivárgás irányában és arra merőleges irányokban, ezért szükséges a longitudinális és a transzverzális diszperzivitás fogalmának bevezetése.

A diszperzió-állandó számításának módját az α_L longitudinális és α_T transzverzális diszperzivitás felhasználásával SCHEIDEGGER (1957) adta meg:

Egydimenziós esetben :

$$D_{xx} = D_x = \alpha_L \bar{v}_x. \quad (2.7.)$$

Kétdimenziós esetben:

$$D_{xx} = \frac{\alpha_T \bar{v}_y^{-2} + \alpha_L \bar{v}_x^{-2}}{\sqrt{\bar{v}_x^{-2} + \bar{v}_y^{-2}}}, D_{yy} = \frac{\alpha_T \bar{v}_x^{-2} + \alpha_L \bar{v}_y^{-2}}{\sqrt{\bar{v}_x^{-2} + \bar{v}_y^{-2}}}, D_{xy} = D_{yx} = \frac{(\alpha_L - \alpha_T) \bar{v}_x \bar{v}_y}{\sqrt{\bar{v}_x^{-2} + \bar{v}_y^{-2}}}. \quad (2.8.)$$

Háromdimenziós esetben:

$$\begin{aligned} D_{xx} &= \frac{\alpha_T (\bar{v}_y^{-2} + \bar{v}_z^{-2}) + \alpha_L \bar{v}_x^{-2}}{\sqrt{\bar{v}_x^{-2} + \bar{v}_y^{-2} + \bar{v}_z^{-2}}} & D_{yy} &= \frac{\alpha_T (\bar{v}_x^{-2} + \bar{v}_z^{-2}) + \alpha_L \bar{v}_y^{-2}}{\sqrt{\bar{v}_x^{-2} + \bar{v}_y^{-2} + \bar{v}_z^{-2}}} \\ D_{zz} &= \frac{\alpha_T (\bar{v}_x^{-2} + \bar{v}_y^{-2}) + \alpha_L \bar{v}_z^{-2}}{\sqrt{\bar{v}_x^{-2} + \bar{v}_y^{-2} + \bar{v}_z^{-2}}} & D_{xy} = D_{yx} &= \frac{(\alpha_L - \alpha_T) \bar{v}_x \bar{v}_y}{\sqrt{\bar{v}_x^{-2} + \bar{v}_y^{-2} + \bar{v}_z^{-2}}} \\ D_{xz} = D_{zx} &= \frac{(\alpha_L - \alpha_T) \bar{v}_x \bar{v}_z}{\sqrt{\bar{v}_x^{-2} + \bar{v}_y^{-2} + \bar{v}_z^{-2}}} & D_{yz} = D_{zy} &= \frac{(\alpha_L - \alpha_T) \bar{v}_y \bar{v}_z}{\sqrt{\bar{v}_x^{-2} + \bar{v}_y^{-2} + \bar{v}_z^{-2}}} \end{aligned} \quad (2.9.)$$

Amennyiben egy vízádban homogén az áramlási sebességtér, azaz a víz szivárgása x irányú, a (2.5.) egyenletek az alábbi formára egyszerűsödnek:

$$F_{x,Hidrodin.diszp.} = \frac{dM_{x3}}{dydzdt} = -D_x \frac{\partial}{\partial x}(\Theta C), F_{y,Hidrodin.diszp.} = \frac{dM_{y3}}{dxdzdt} = -D_y \frac{\partial}{\partial y}(\Theta C)$$

$$F_{z,Hidrodin.diszp.} = \frac{dM_{z3}}{dxdydt} = -D_z \frac{\partial}{\partial z}(\Theta C), \quad (2.10.)$$

ahol $D_x = \alpha_L \bar{v}_x$, $D_y = \alpha_T \bar{v}_x$, $D_z = \alpha_T \bar{v}_x$.

A szennyezőanyag-transzport diffúzió, illetve hidrodinamikai diszperzió miatti komponenseinek számítása Fick I.törvényén alapulnak, ezért célszerű a (2.3.) és (2.5.) egyenletekben szereplő effektív diffúzió-állandót és hidrodinamikai diszperzió-állandót összevonni a szennyezőanyag szóródását meghatározó D^* diszperzió-állandóba:

$$D_x^* = D_{eff} + D_x, D_y^* = D_{eff} + D_y \text{ és } D_z^* = D_{eff} + D_z. \quad (2.11.)$$

2.1.2.4. Az adszorpció

Az adszorpció a szennyezőanyag porózus közeg felületén történő reverzibilis megkötődését jelenti. Ez a folyamat a modellezett tér anyagmértékében hasonlóan viselkedik, mint egy időben állandóan változó forrás vagy nyelő, függően attól, hogy az adott koncentrációviszonyok között a megkötődés (adszorpció), vagy a szennyező anyag oldatba jutása (deszorpció) az uralkodó felületi kémiai folyamat.

Az adszorbeált és deszorbeált anyagmennyiségek egyensúlyát az alábbi matematikai egyenlőség írja le:

$$\Theta \cdot dV \frac{\mathcal{C}}{\mathcal{A}} = -\rho_b \cdot dV \frac{\partial \bar{C}}{\mathcal{A}}, \quad (2.12.)$$

ahol C a pórufolyadék koncentrációja $[M/L^3]$, \bar{C} a szennyezőanyag koncentrációja a talajban $[M/M_{száraz\ talaj}]$, ρ_b a porózus közeg testsűrűsége $[M/L^3]$ és Θ a térfogatszázalékban kifejezett víztartalom $[-]$ (amely telített közegben egyenlő a hézagtérfogattal) és V a teljes vizsgált térfogat.

Ha a kémiai egyensúly kialakult, a megkötött anyag koncentrációja számítható:

$$\bar{C} = K_d C, \quad (2.13.)$$

ahol K_d az egyensúlyi folyamat megoszlási együtthatója.

A fentiek alapján a szorpciós folyamatok miatt egy adott V térfogatban a koncentrációváltozás miatt bekövetkező kémiai anyagmennyiség megváltozását a következő matematikai alakban írhatjuk le:

$$\frac{\mathcal{M}}{\mathcal{A}dV} = \frac{\partial(\Theta C)}{\mathcal{A}} = -\rho_b K_d \frac{\mathcal{C}}{\mathcal{A}}. \quad (2.14.)$$

A (2.14.) egyenletben a negatív előjel azt jelzi, hogy miközben a pórufolyadék koncentrációja emelkedik, addig a szorpciós folyamatok miatt szennyezőanyag távozik el – reverzibilisen – a rendszerből.

A (2.13.) alapján látható, hogy a C pórufolyadék koncentráció és \bar{C} talajbeli szennyezőanyag koncentráció között összefüggés van. Az összefüggést egy függvény írja le, ami a szennyezőanyag koncentrációján kívül még a hőmérséklettől is jelentősen függ. Annak érdekében, hogy a hőmérséklet-függést kizárjuk a pórufolyadék és az adszorptívum koncentrációja közötti összefüggést állandó hőmérsékleten vesszük fel, ezért az említett függvényt *szorpciós izotermának* nevezzük.

Ha feltételezzük, hogy az adszorbeált anyag mennyisége és a pórufolyadék egyensúlyi koncentrációja egyenesen arányos egymással, azaz az adszorpció lineáris (*Henry-féle szorpciós izoterma*), akkor a K_d megoszlási együttható (amennyiben eltekintünk a hőmérséklet-változástól) állandónak tekinthető.

A gyakorlatban előforduló esetek nagy részében (például nehézfémeknek az agyagásványokon való megkötődése esetén, vagy ha az oldott anyag koncentrációja nagy), ez a feltétel nem teljesül, azaz a pórufolyadék egyensúlyi koncentrációja nem egyenesen arányos a megkötött anyagmennyiséggel, ezekben az esetekben a megkötődő anyagok mennyiségét nem-lineáris adszorpciós izotermák segítségével jellemezhetjük.

A vizsgált komponensnek a pórufolyadékban, illetve a megkötő felületen való megoszlási viszonyát kvázi-egyensúlyi helyzetben, állandó hőmérsékleten egy előre meghatározott koncentrációintervallumban mérjük. A

kapott eredmények adják a *szorpciós izoterma tapasztalati pontjait*. Ezen pontokra adott matematikai formában felírható görbéket illesztünk, amelyek közül a gyakorlatban leggyakrabban a *Freundlich* és a *Langmuir izotermákat* alkalmazzuk.

A *Freundlich izoterma* (10.a ábra) esetén az emelkedő koncentrációval exponenciálisan növekszik a megkötődő anyagmennyiség, azaz:

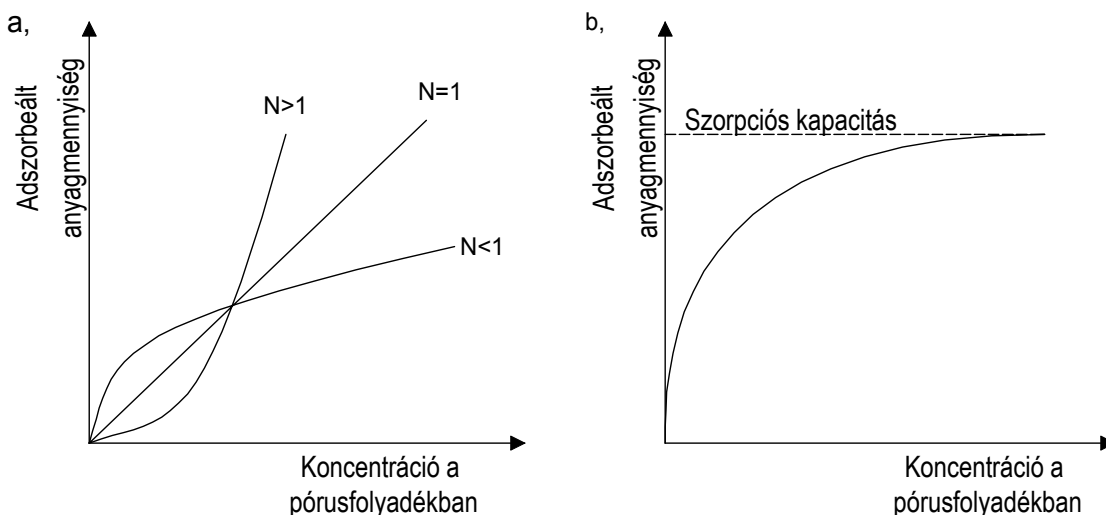
$$\bar{C} = A + K \cdot C^N, \quad (2.15.)$$

ahol K a koncentrációtól függően változó megoszlási együttható, és A és N Freundlich-állandók.

A *Langmuir izoterma* (10.b ábra) esetében arra vagyunk tekintettel, hogy a megkötő felület véges és ezen meghatározott mennyiségű szorpcióra alkalmas belépési pont található. Éppen ezért a megkötődő anyagmennyiség egy \bar{C}_{\max} telítési határértékhez közelít. Ebben az esetben a megkötött anyagmennyiség hiperbolikusan közelít ehhez a telítési határértékhez a koncentráció emelkedésével:

$$\bar{C} = \bar{C}_{\max} \cdot \frac{KC}{1 + KC}, \quad (2.16.)$$

ahol K állandó.



10. ábra

A Langmuir (a) és a Freundlich (b) izoterma alakja

A Freundlich-izoterma elsősorban akkor írja le jellemzőbben a szorpciós folyamatokat, amikor uralkodóan egy ioncserélődési folyamatról van szó, azaz a megkötött felületen nagy számban „A” ionok kötődtek meg, amelyek egy „B” ion koncentrációjának függvényében részben „B” ionokra cserélődnek ki. Ebben az esetben a koncentráció növekedésével fokozatosan nő a megkötött, „A”-ról „B”-re cserélt ionok száma, amit jól leír a Freundlich-izoterma folyamatosan emelkedő és nem határértékhez tartó görbéje. Ebben az esetben a nagymennyiségű ellenion miatt elhanyagoljuk a felületi koncentrációváltozást.

A Langmuir-izoterma inkább „üres” szorpciós helyek feltöltődése esetén alkalmazható vagy ha elhanyagoljuk a deszorbeált anyag koncentrációváltozását. Ekkor adott számú felületi megkötésre alkalmas hely létezik a rendszerben, amelyek a koncentráció növekedésével exponenciálisan fogyni kezdenek, amit jól követ a Langmuir-izoterma határértékhez közelítő jellege. A valóságban mindkét felvázolt folyamat a rendszerekben jelen van, ezért a két folyamat aránya határozza meg azt, hogy vajon melyik izoterma írja le jobban egy adott rendszer viselkedését (CZINKOTA, 1994).

A nem lineáris adszorpció esetén a számítások a (2.13.) egyenlet szerint történnek, ugyanakkor a K_d megoszlási együttható helyett az adszorpciós izotermák alapján az aktuális koncentrációértéknek megfelelően számított K_d' értéket kell időről időre változóan behelyettesíteni, amely megfelel az izoterma adott koncentráció értékénél vett deriváltjával.

Alkalmazhatjuk a korábban leírtakat egy kétfázisú rendszerre, ahol az anyagmennyiséget kívülről változtatjuk. A megoszlási együttható definíciószerűen

$$K_d = \frac{dC_{adszorbeált}}{dC_{oldott}} = \frac{dC_a}{dC_f}, \quad (2.17.)$$

ezért az adszorbens koncentrációjának megváltozása elvileg

$$dC_a = K_d \cdot dC_f. \quad (2.18.)$$

Tekintve egy V térrészt, amelyben nV a pórusok térfogata, így a megkötött és a pórusokban található anyagmennyiségek egyensúlya

$$V \cdot dC_a = -nV \cdot K_d \cdot dC_f, \quad (2.19.)$$

amennyiben az adszorbens koncentrációját a teljes térfogatra vetítjük. Feltételezve, hogy dM az a kémiai anyagmennyiség, amely egy adott idő alatt a rendszerbe jut és amelynek egy része megkötődik, egy másik része pedig folyadékfázisban marad, ezért

$$dM = V \cdot dC_a + nV \cdot dC_f. \quad (2.20.)$$

Ebből a bevitt kémiai anyagmennyiség és a folyadékfázisra, illetve a teljes térfogatra vetített koncentrációváltozás kapcsolata:

$$dM = nVK_d^* \cdot dC_f + nV \cdot dC_f, \text{ azaz} \quad (2.21.)$$

$$dM = nV \cdot dC_f (1 + K_d^*) \text{ és} \quad (2.22.)$$

$$dM = V \cdot dC_a + nV \cdot \frac{dC_a}{nK_d^*}, \text{ azaz} \quad (2.23.)$$

$$dM = V \cdot dC_a \left(1 + \frac{1}{K_d^*} \right). \quad (2.24.)$$

Mivel általában a megoszlási együtthatót mól/kg talaj vagy mg/kg talaj adszorbeált anyagmennyiségek mellett mg/dm^3 vagy mg/m^3 pórusfolyadék koncentrációk mellett adják meg, ugyanakkor a vizsgált rendszerben nem feltétlenül 1 kg adszorbens van jelen literenként vagy köbméterenként, ezért a megoszlási együtthatókat az adott rendszerre átszámítani szükséges. Ennek alapján

$$K_d^* = K_d \frac{\rho_n}{n} \quad (2.25.)$$

dimenzió nélküli szám.

Ezeknek az egyenleteknek a felhasználása a számítások során azért előnyös, mert azt biztosítják, hogy az adszorbeált anyagmennyiség, és ezért a adszorbeált anyag koncentrációja az adszorbensben az izoterma vízszinteshez közelítő szakaszán (Langmuir-izoterma) tovább már nem nő, ugyanakkor az is biztosított, hogy maximálisan akkora kémiai anyagmennyiség adszorbeálódhat, amennyit a folyadékfázis tartalmazott. Ez a később bemutatott numerikus számítások stabilizálásánál válik fontossá.

2.1.2.5. A bomlás

A bomlási folyamatok a szennyezőanyag mennyiségének időbeli csökkenéséhez, degradációjához vezetnek. Bár a bomlás két alapvető típusa a kémiai bomlás és a radioaktív bomlás jellegében alapvetően különbözik egymástól, a szennyezőanyagok terjedésének modellezésekor mégis azonos matematikai formában vehetők figyelembe, melynek algebrai alakja:

$$\frac{dM}{dVdt} = \frac{\partial(\Theta C)}{\partial t} = -\lambda(\Theta C + \rho_b K_d C), \quad (2.26.)$$

ahol λ a bomlási állandó.

A (2.26.) egyenlet első tagja a folyadékfázisból, második tagja a megkötött fázisból való bomlást írja le. Tekintve, hogy a (2.26.) összefüggés, mind a pórustérben lévő, mind a felületen megkötött szennyezőanyag

esetében λ intenzitású bomlást tételez fel, ez az egyenlet elsősorban a radioaktív bomlásra vonatkozóan írható fel. Biodegradáció esetén a bomlás üteme a folyadék, illetve a szilárd fázisban jelentősen eltér:

$$\frac{dM}{dVdt} = \frac{\partial(\Theta C)}{\partial t} = -\lambda_1 \Theta C - \lambda_2 \rho_b K_d C. \quad (2.27.)$$

Ebben az esetben a megkötött szennyezőanyag bomlására vonatkozóan általában nem rendelkezünk ismeretekkel, csak azt feltételezhetjük, hogy intenzitása nagyságrenddel kisebb, mint folyadékfázisban. Ha $\lambda_2 \ll \lambda_1$, akkor a szilárd fázisban bekövetkezett bomlást a biztonság javára történő elhanyagolással figyelmen kívül hagyhatjuk:

$$\frac{dM}{dVdt} = \frac{\partial(\Theta C)}{\partial t} = -\lambda_1 \Theta C. \quad (2.28.)$$

A fenti összefüggés azonban a kémiai reakciók egy részét, az elsődrendű kinetikájú, reverzibilis reakciókat írja le. Emiatt azokban az esetekben, amikor a bonyolultabb kémiai folyamatokat is követni szükséges, speciális, a hidraulikai számításokkal kompatibilis kémiai modulokat használnak fel, melyek rendkívül erősen megnövelik a feladatmegoldás erőforrásigényét. Éppen ezért ezek a megoldások az általános hidrodinamikai és transzport-modellezési gyakorlatban nem terjedtek el.

2.1.3. A porózus közegben mozgó konzervatív szennyezőanyagokra érvényes transzportegyenlet

A transzport-egyenletnek több formáját használják a gyakorlatban. Amennyiben valamennyi szennyeződésterjedési folyamatot vizsgálni kívánjuk, akkor az általános transzport-egyenlet megoldására van szükség:

$$\begin{aligned} \frac{dM}{dVdt} = & D_{xx}^* \frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial x^2} + D_{xy}^* \frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial x \partial y} + D_{xz}^* \frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial x \partial z} + D_{yx}^* \frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial y \partial x} + D_{yy}^* \frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial y^2} + \\ & + D_{yz}^* \frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial y \partial z} + D_{zx}^* \frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial z \partial x} + D_{zy}^* \frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial z \partial y} + D_{zz}^* \frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial x}(v_x C) - \\ & - \frac{\partial}{\partial y}(v_y C) - \frac{\partial}{\partial z}(v_z C) - \frac{\partial}{\partial t}(\rho_b K_d C) - \lambda(\Theta C + \rho_b K_d C) \end{aligned} \quad (2.29.)$$

Amennyiben a közeg telített:

$$\begin{aligned} \frac{dM}{ndVdt} = & D_{xx}^* \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_{xy}^* \frac{\partial^2 C}{\partial x \partial y} + D_{xz}^* \frac{\partial^2 C}{\partial x \partial z} + D_{yx}^* \frac{\partial^2 C}{\partial y \partial x} + D_{yy}^* \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_{yz}^* \frac{\partial^2 C}{\partial y \partial z} + \\ & + D_{zx}^* \frac{\partial^2 C}{\partial z \partial x} + D_{zy}^* \frac{\partial^2 C}{\partial z \partial y} + D_{zz}^* \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{v_x C}{n} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{v_y C}{n} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{v_z C}{n} \right) - \\ & - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho_b K_d C}{n} \right) - \lambda \left(C + \frac{\rho_b K_d C}{n} \right) \end{aligned} \quad (2.30.)$$

Behelyettesítve az R késleltetési tényezőt:

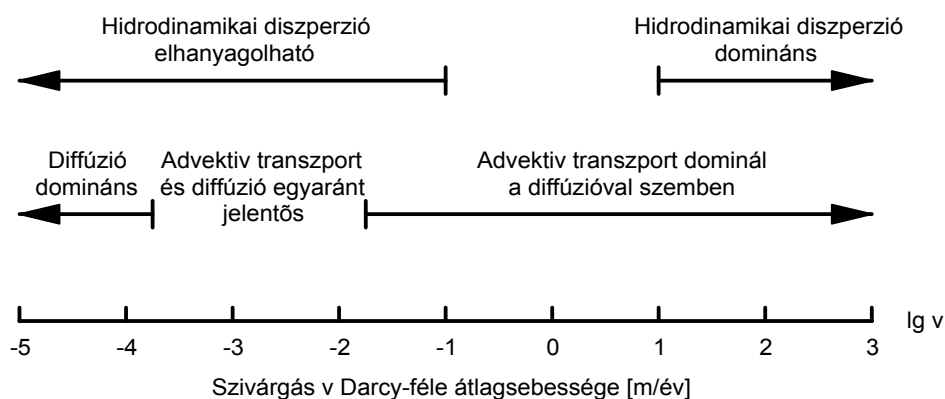
$$\begin{aligned} R \frac{dM}{ndVdt} = & D_{xx}^* \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_{xy}^* \frac{\partial^2 C}{\partial x \partial y} + D_{xz}^* \frac{\partial^2 C}{\partial x \partial z} + D_{yx}^* \frac{\partial^2 C}{\partial y \partial x} + D_{yy}^* \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \\ & + D_{yz}^* \frac{\partial^2 C}{\partial y \partial z} + D_{zx}^* \frac{\partial^2 C}{\partial z \partial x} + D_{zy}^* \frac{\partial^2 C}{\partial z \partial y} + D_{zz}^* \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{v_x C}{n} \right) - \\ & - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{v_y C}{n} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{v_z C}{n} \right) - \lambda RC \end{aligned} \quad (2.31.)$$

Egyes esetekben a szorpciós és bomlási folyamatok elhanyagolhatók, ilyen például egy áramló talajvízben, egy kavics-homokos kavics vízadóba telepített kút vagy kútcsoport közelében történő számítás. A homok és a kavics

felületén megkötődő anyagmennyiségeket elhanyagolhatjuk és a gyorsan lejátszódó folyamatok miatt a bomlás számításától is eltekinthetünk. Ezt a helyzetet az advektív-diszperzív transzport-egyenlet írja le, amely a (2.29.-2.31) egyenletek megfelelő tagjainak elhagyásával kapható meg. Amennyiben a szivárgás iránya azonos az egyik koordináta tengellyel, akkor a transzport egyenlet további tagjai válnak zérussá, így az egyenlet tovább egyszerűsödik.

A szennyezőanyagok szóródásáról, diszperziójáról megemlítjük, hogy a szennyezőanyag diszperziója mindenképpen bekövetkezik, azonban a diszperziót okozó domináns folyamat eltérő lehet. Amennyiben a szivárgás sebessége kicsi, akkor a diffúzió a domináns folyamat, mivel a hidrodinamikai diszperzió-állandó, ekkor sebességarányosan kicsi. Amennyiben a szivárgás sebessége jelentős (áramló talajvíz esete), akkor az advektív transzport mellett a hidrodinamikai diszperzió okozza a szennyezőanyag szóródását, melyhez képest a diffúzió okozta anyagáramok elhanyagolhatóvá válnak (11. ábra).

Problémát jelent a *nem-konzervatív, adszorbeálódó szennyezőanyagok* mozgásának követése. Ezek az anyagok a gyakorlatban sokszor előfordulnak, ugyanakkor szorpciós tulajdonságaik többnyire ismeretlenek. Ezért a figyelem mindjobban az anyagjellemzők meghatározására irányul, valamint a cél olyan hidraulikai modellek kifejlesztése, amelyekkel a hidraulikai jelenségeken túl, az áramló folyadékban lejátszódó kémiai folyamatok is megfelelően követhetők.



11. ábra

Az advektív transzport, a diffúzió és a hidrodinamikai diszperzió okozta anyagáramok összevetése a szivárgási sebesség (szivárgási tényező) függvényében (ROWE, 1987)

2.2. A transzportegyenlet megoldási módjai

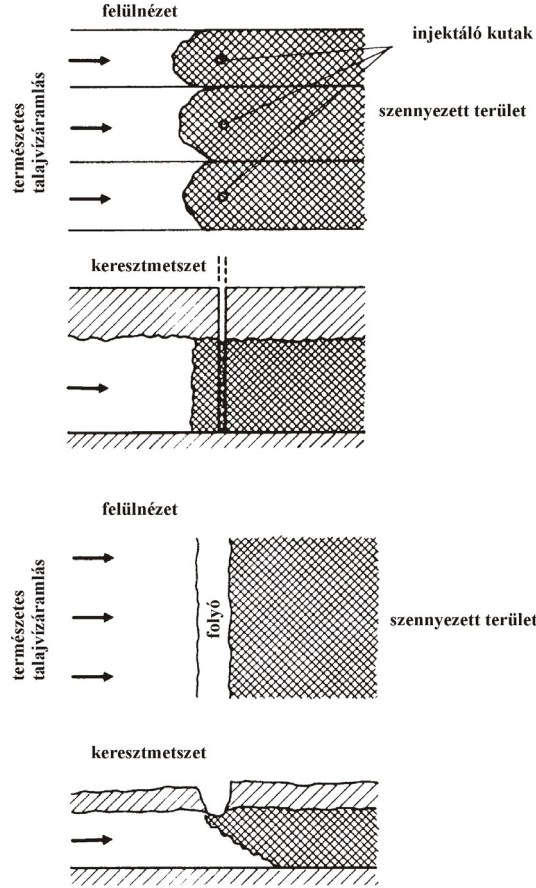
A fejezetben megismert transzportegyenletnek a szivárgás alapegyenletéhez hasonlóan számos megoldási módja ismeretes. Ezek közül csak néhány ismertebb, az általunk vizsgált problémák megoldására alkalmas megoldást mutatunk be.

2.2.1. Analitikus megoldások

Egyszerű esetekre a transzportegyenlet analitikusan is megoldható. Ezek a megoldások adják egy-egy probléma felmerülésekor a legfontosabb első becsléseket és egyben az analitikus megoldásokkal való összevetéssel szokás egy újonnan kifejlesztett számítási algoritmusokat is ellenőrizni is. Mivel a korábban felírt transzport-egyenletnek - az analitikus megoldásokon túlmenően - csak közelítő megoldásai ismertek, ezért tartjuk szükségesnek az alapegyenletek analitikus úton - különböző kezdeti és peremfeltételek mellett - történő megoldásának részletes tárgyalását. Az analitikus megoldások eredményeként kapott, egyszerű formulák lehetőséget biztosítanak egyszerű függvényvizsgálaton alapuló hibaanalízis végrehajtására is, amelynek segítségével a transzport-folyamatokat leíró paramétereknek a számított koncentráció nagyságára vonatkozó hatása becsülhető.

2.2.1.1. Egydimenziós megoldások

Az egydimenziós analitikus megoldások a gyakorlatban elsősorban állandó áramlási sebesség mellett, a sebességvektor irányára merőlegesen elhelyezett kutak esetén, vagy pl. egy folyóból történő elszivárgás számítására alkalmazhatók (12. ábra)



12. ábra

A transzport-egyenlet egydimenziós analitikus megoldásainak alkalmazási területei
(SAUTY, 1980)

Tekintsük a (2.31.) egyenlet alábbi egydimenziós formáját, ahol a víztartó vastagsága m , infinitezimálisan kicsiny szélessége w , a koncentráció-gradiens y és z irányban zérus:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\alpha_L \bar{v}_x}{R} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{\bar{v}_x}{R} \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda C. \quad (2.32.)$$

Legyen a pillanatnyi szennyezés tömege M az $x=0$ helyen $t=0$ időpontban. Ezt a kezdeti feltételt a Dirac-delta függvénnyel lehet leírni:

$$C_\delta(x,0) = \frac{M}{n_0 m w R} \delta(x), \quad (2.33.)$$

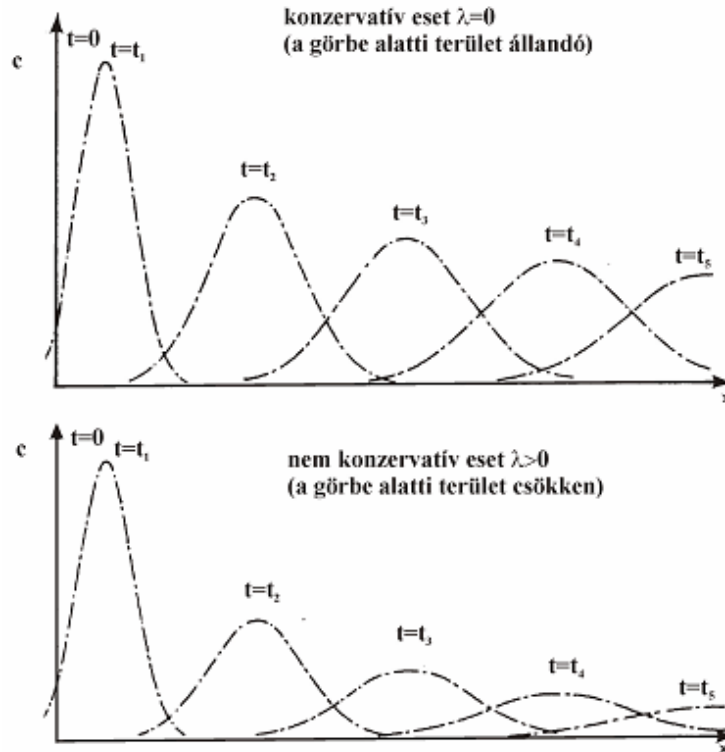
ahol a Dirac-delta függvény:

$$\delta(x) = 0, \text{ ha } x \neq 0 \text{ és } \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1, \text{ ha } x = 0. \quad (2.34.)$$

Másfelől legyen $C(\pm\infty, t) = 0$. Ebben az esetben a megoldás a jól ismert Gauss-görbe:

$$C(x,t) = \frac{M}{2 w m n_0 R \sqrt{\frac{\pi \alpha_L \bar{v}_x t}{R}}} \exp \left(- \frac{\left(x - \frac{\bar{v}_x t}{R} \right)^2}{\frac{4 \alpha_L \bar{v}_x t}{R}} \right) \exp(-\lambda t). \quad (2.35.)$$

Ez a haranggörbe \bar{v}_x / R sebességgel mozog az időben az x tengely pozitív irányában, a szórása $\sqrt{2\alpha_L \bar{v}_x t / R}$. A függvény amplitúdója az időben csökken (13. ábra).



13. ábra

Pillanatnyi szennyeződés terjedésének időbeli lefolyása bomlás nélkül és bomlással

Ismerve a koncentráció időbeli alakulását egy pillanatnyi szennyezésre, bármilyen időbeli lefutású szennyezés esetére függvények konvolúciójával a koncentráció-idő függvény meghatározható, mivel a transzportegyenlet lineáris és a peremfeltétel homogén.

Tekintve egy változó aktivitású forrást az $x=0$ helyen és az időben $\dot{M}(t) = \frac{dM}{dt}$ formában változó tömegáramot, a megoldás:

$$C(x,t) = \int_0^t \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{C_\delta(x, t-\tau)}{\Delta\tau} d\tau =$$

$$= \int_0^t \frac{\dot{M}(\tau)}{2\omega m n_0 R \sqrt{\frac{\pi\alpha_L \bar{v}_x(t-\tau)}{R}}} \exp\left(-\frac{\left(x - \frac{\bar{v}_x(t-\tau)}{R}\right)^2}{\frac{4\alpha_L \bar{v}_x(t-\tau)}{R}}\right) \exp(-\lambda(t-\tau)) d\tau. \quad (2.36.)$$

Amennyiben a szennyezőanyag terhelés megoszoló és az értéke egységnyi hosszra vetítve $\mu(x,t)$, a koncentrációt a t időpontban így számíthatjuk:

$$C(x,t) =$$

$$= \int_{\xi=-\infty}^{\infty} \int_{\tau=0}^t \frac{\mu(\xi,t)}{2wmn_0 R \sqrt{\frac{\pi \alpha_L \bar{v}_x(t-\tau)}{R}}} \exp \left(- \frac{\left(x - \xi - \frac{\bar{v}_x(t-\tau)}{R} \right)^2}{\frac{4 \alpha_L \bar{v}_x(t-\tau)}{R}} \right) \exp(-\lambda(t-\tau)) d\tau d\xi. \quad (2.37.)$$

Ez az egyenlet az egyszerű (idealizált) lefolyású szennyezési esetekre analitikusan megoldható. Amennyiben a forrás az $x=0$ pontban található, \dot{M} = állandó, valamint a szennyezés kezdeti időpontja $t=0$, ekkor a megoldás:

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2} \exp \left(\frac{x}{2\alpha_L} \right) \left[\exp \left(\frac{-\gamma x}{2\alpha_L} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{\frac{x - \bar{v}_x t \gamma}{R}}{2 \sqrt{\frac{\alpha_L \bar{v}_x t}{R}}} \right) - \exp \left(\frac{\gamma x}{2\alpha_L} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{\frac{x + \bar{v}_x t \gamma}{R}}{2 \sqrt{\frac{\alpha_L \bar{v}_x t}{R}}} \right) \right], \quad (2.38.)$$

$$\text{ahol } C_0 = \frac{\dot{M}}{wmn_0 \bar{v}_x}, \quad \gamma = \sqrt{1 + \frac{4\lambda \alpha_L R}{\bar{v}_x}}, \quad \text{és ahol } \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-\xi^2) d\xi, \quad \text{illetve}$$

$\operatorname{erfc}(\xi) = 1 - \operatorname{erf}(\xi)$ a standard hibafüggvény és annak komplementere.

Egydimenziós transzport-folyamatokkal írhatók le a laboratóriumi oszlopkísérletek is. Ebben az esetben az egyenletet kissé eltérő peremfeltételek mellett oldjuk meg:

$$C(0,t) = \begin{cases} 0, & \text{ha } t < 0 \\ C_0, & \text{ha } t \geq 0 \end{cases} \quad \text{és} \quad \begin{cases} C(\infty,t) = 0, & \text{minden } t \text{-re} \\ C(x,0) = 0, & \text{ha } x > 0 \end{cases}.$$

A megoldást OGATA (1970), OGATA és BANKS (1961), valamint GUPTA és PANDEY (1980) adta meg egymástól alig eltérő formában:

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2} \exp \left(\frac{x}{2\alpha_L} \right) \left[\exp \left(\frac{-\gamma x}{2\alpha_L} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{\frac{x - \bar{v}_x t \gamma}{R}}{2 \sqrt{\frac{\alpha_L \bar{v}_x t}{R}}} \right) + \exp \left(\frac{\gamma x}{2\alpha_L} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{\frac{x + \bar{v}_x t \gamma}{R}}{2 \sqrt{\frac{\alpha_L \bar{v}_x t}{R}}} \right) \right], \quad (2.39.)$$

ahol C_0 az influens koncentráció és $\gamma = \sqrt{1 + \frac{4\lambda \alpha_L R}{\bar{v}_x}}$. Nagy Peclet- számok esetén, amikor

$$Pe = \frac{x}{\alpha_L} = \frac{x}{D_x \cdot \bar{v}_x} > 10 \quad \text{mindkét bemutatott eset jól közelíthető az alábbi formulával:}$$

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2} \exp \left(\frac{x}{2\alpha_L} (1 - \gamma) \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{\frac{x - \bar{v}_x t \gamma}{R}}{2 \sqrt{\frac{\alpha_L \bar{v}_x t}{R}}} \right). \quad (2.40.)$$

Amennyiben a nem bomló szennyezőanyag az áramlási közeg felületén nem adszorbeálódik ($R=1$ és $\lambda=0$), a (2.40.) összefüggés tovább egyszerűsödik:

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \bar{v}_x t}{2 \sqrt{\alpha_L \bar{v}_x t}} \right). \quad (2.41.)$$

A (2.41.) egyenlet az alapja a diszperzió-állandó laboratóriumi meghatározásának. Az egyenletből levezethető, hogy amennyiben a relatív koncentráció $C/C_0=0.5$, azaz ahol az áttörési görbének inflexiós pontja van, ott a koncentráció-gradiensre vonatkozóan igaz, hogy

$$\left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{x=\bar{v}_x t} = \frac{C_0}{2\sqrt{\pi\alpha_L x}}. \quad (2.42.)$$

A kísérlet során a koncentrációt egy adott pontban az idő függvényében mérjük és meghatározzuk a koncentráció-profil meredekségét. Tekintettel arra, hogy a transzport-folyamat egydimenziós, ezért minden t időponthoz egy $x = \bar{v}_x \cdot t$ hely tartozik és ennek alapján két közeli t_i időpont felhasználásával a $\Delta C/\Delta x$ koncentráció-gradiens is meghatározható. Amikor a C mért koncentráció éppen $C_0/2$, akkor a (2.42.) egyenlet alapján a longitudinális diszperzivitás számíthatóvá válik.

Az OGATA féle oszlopkísérlet megoldásából indult ki SHACKELFORD (1990), amikor a szigetelőrétegen való átjutáshoz szükséges idők számítására alkalmas megoldást fejlesztett ki. A megoldás alapja a (2.43.) egyenlet, amelyik a (2.39.) egyenletből származtatható:

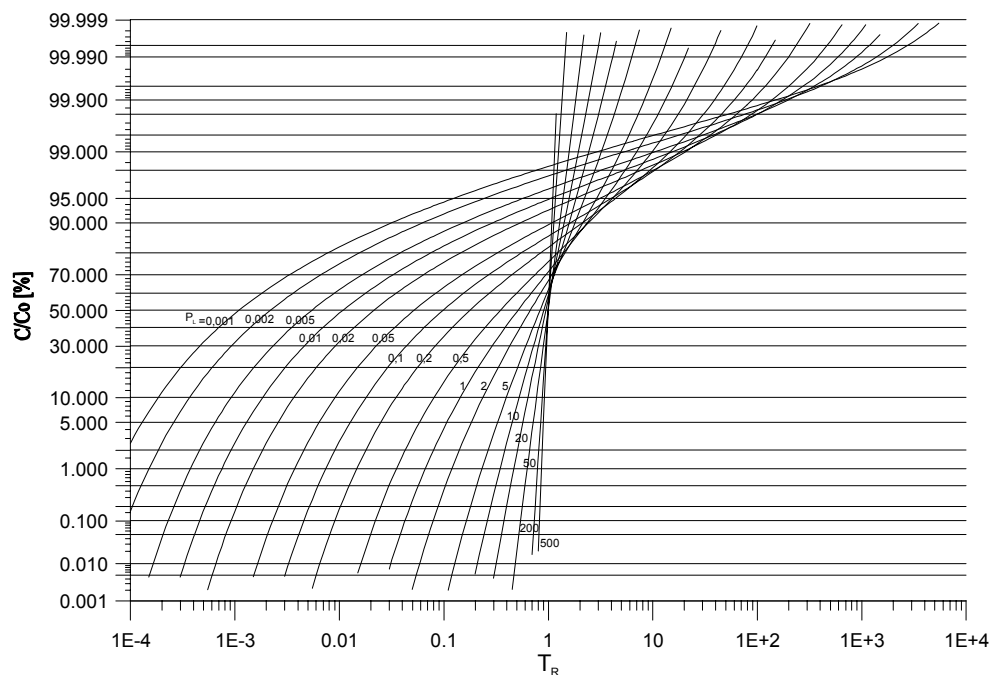
$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{1-T_R}{2\sqrt{T_R/P_L}} \right) + \exp(P_L) \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{1+T_R}{2\sqrt{T_R/P_L}} \right) \right], \quad (2.43.)$$

ahol $T_R = Co_R = \frac{\bar{v}_x \cdot t}{R \cdot x}$ Courant-szám és a $P_L = Pe_L = \frac{\bar{v}_x \cdot x}{D_x^*}$ Peclet-szám. Amennyiben nagyon kicsi

a szivárgás sebessége, akkor $D_x^* = D_{eff} + \bar{v}_x \cdot \alpha_L$, ha azonban a diszperzív transzportfolyamatok közül a hidrodinamikai diszperzió dominál a diffúzióhoz képest, akkor $D_{eff} \ll \bar{v}_x \cdot \alpha_L$, ezért

$D_x^* \cong \bar{v}_x \cdot \alpha_L$ diszperzió-állandó használható.

A megoldás során a kérdés, hogy konstans C_0 koncentrációjú influens oldat esetén egy adott x távolságban mekkora t idő elteltével válik a koncentráció értéke C értékűvé. A feladat tehát inverz: nem a koncentrációt keressük a hely és az idő függvényében $C=C(x,t)$, hanem a t időpontot egy adott x helyen a bemenő és a kialakuló koncentráció függvényében $t=t(C,C_0)$.



14. ábra

Összefüggés a Courant-szám és a C/C_0 relatív koncentráció között
(SHACKELFORD, 1990)

A keresett t időpontot csak a T_R Courant-szám ismeretében kaphatjuk meg, ez ugyanakkor zárt alakban a (2.43.) egyenletből nem kapható meg. A számításokhoz egy nomogramot használunk fel, amelyik az adott Peclet-számok esetére a Courant-szám és a C/C_0 relatív koncentráció közötti összefüggést ábrázolja (

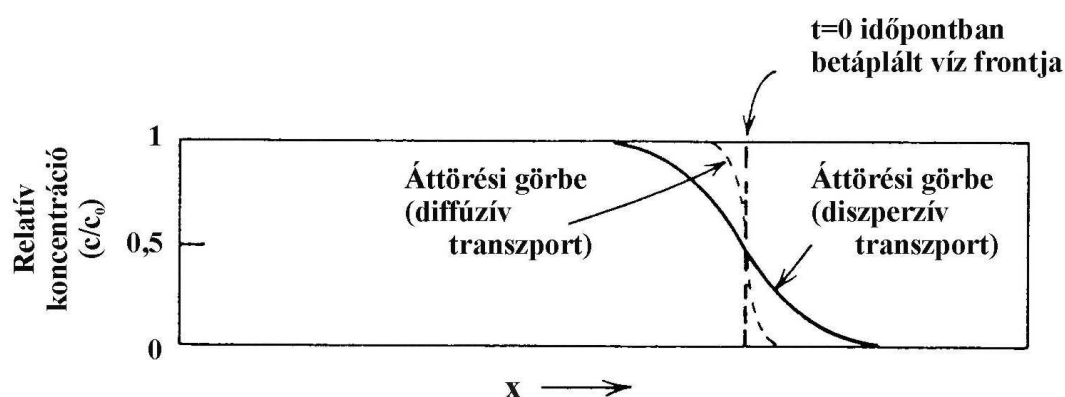
14. ábra).

A megoldás során az adott x távolságra meghatározzuk a Peclet-számot, majd ennek ismeretében és az elérendő koncentrációhoz tartozó C/C_0 relatív koncentráció függvényében a

14. ábra segítségével meghatározzuk a Courant számot, amiből a t idő a (2.43.) egyenlet alapján számítható.

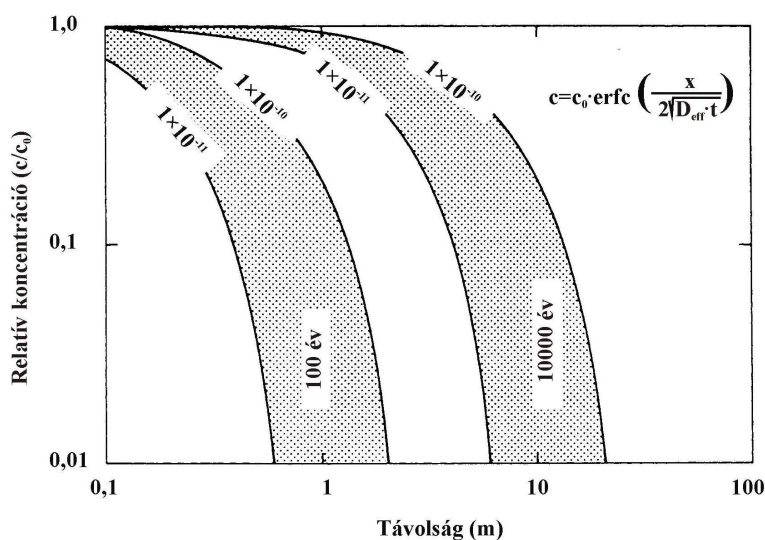
Egy másik ismert megoldás, ami a (2.39.) egyenletből is levezethető, a pusztán diffúzió esete. Ekkor a szivárgás pórusbeli \bar{V}_x sebessége zérus, így sem advektív transzport sem hidrodinamikai diszperzió nem léphet fel. Ebben az esetben a megoldás:

$$C = C_0 \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{\frac{D_x^* t}{R}}} = C_0 \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{\frac{D_{\text{eff}} t}{R}}} \quad (2.44.)$$



15. ábra

Az advektív, advektív-diffúzív és az advektív-diszperzív transzport áttörési görbéinek összehasonlítása (FREEZE – CHERRY, 1979)



$10^{-10} \text{ m}^2/\text{s} > D_{\text{eff}} \text{ effektív diffúzió állandó} > 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$

16. ábra

A diffúzív transzport áttörési görbéi 10^{-10} és $10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ effektív diffúzió-állandó esetén (FREEZE – CHERRY, 1979)

2.2.1.2. Kétdimenziós megoldások

Legyen az áramlás iránya párhuzamos az x tengellyel. Ebben az idealizált esetben a (2.31.) egyenlet a következő formában írható fel:

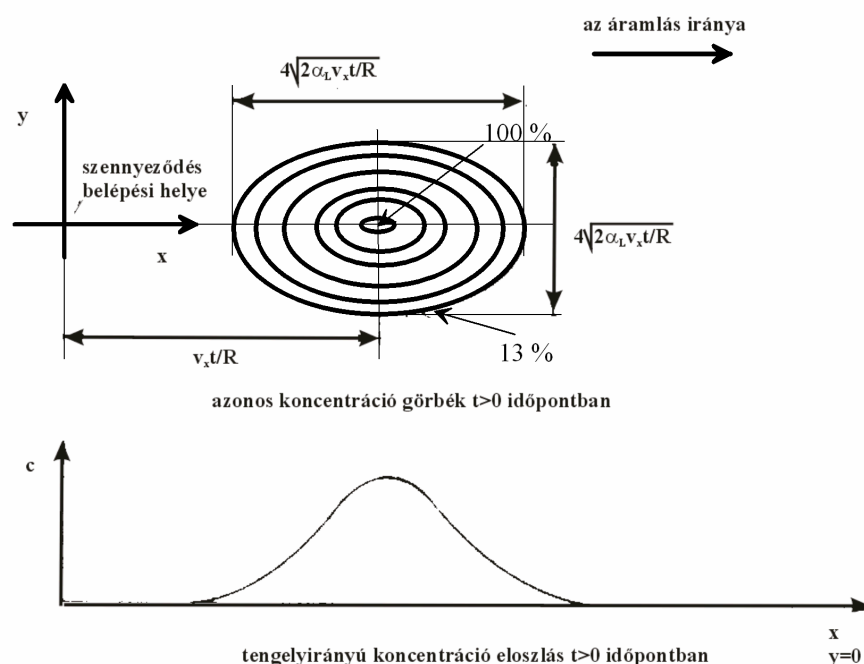
$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\alpha_L \bar{v}_x}{R} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\alpha_T \bar{v}_x}{R} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - \frac{\bar{v}_x}{R} \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda C. \quad (2.45.)$$

Legyen a pillanatnyi M tömegű szennyezés ismét az x=0 és y=0 helyen t=0 időpontban. A kezdeti feltétel:

$$C(x, y, 0) = \frac{M}{n_0 m R} \delta(x) \delta(y), \text{ ahol } \delta(x) \text{ és } \delta(y) - \text{ a korábbiakhoz hasonlóan - a Dirac-delta függvény,}$$

másfelől legyen $C(\pm\infty, \pm\infty, t) = 0$. Ebben az esetben a megoldás (CSANÁDY, 1973):

$$C_\delta(x, y, t) = \frac{M}{4\pi m n_0 \bar{v}_x t \sqrt{\alpha_L \alpha_T}} \exp \left(- \frac{\left(x - \frac{\bar{v}_x t}{R} \right)^2}{\frac{4\alpha_L \bar{v}_x t}{R}} - \frac{y^2}{\frac{4\alpha_T \bar{v}_x t}{R}} \right) \exp(-\lambda t). \quad (2.46.)$$



17. ábra
Pillanatnyi szennyezőforrás okozta koncentráció-eloszlás

Ez az egyenlet az alapja a nyomjelzéses vizsgálatokat követő számításoknak két megfigyelő kút esetén. A korábbiakhoz hasonlóan, ismerve a koncentráció időbeli alakulását egy pillanatnyi szennyezésre, bármilyen időbeli lefutású szennyezés esetére integrál-számítással a koncentráció-idő függvény meghatározható. Tekintve egy változó aktivitású forrást az x=0 és y=0 helyen és az időben változó tömegáramot $\dot{M}(t) = \frac{dM}{dt}$ formában, a megoldás:

$$\begin{aligned}
C(x, y, t) &= \int_0^t \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{C(x, y, t - \tau)}{\Delta t} d\tau = \\
&= \frac{\dot{M}(t)}{4\pi m n_0 \sqrt{\alpha_L \alpha_T}} \int_0^t \frac{1}{t - \tau} \exp \left(- \left(\frac{x - \frac{\bar{v}_x(t - \tau)}{R}}{\frac{4\alpha_L \bar{v}_x(t - \tau)}{R}} - \frac{y^2}{\frac{4\alpha_T \bar{v}_x(t - \tau)}{R}} \right) \exp(-\lambda(t - \tau)) d\tau = \quad (2.47.) \\
&= \frac{\dot{M}(t)}{4\pi m n_0 \sqrt{\alpha_L \alpha_T}} \int_0^{\frac{4\alpha_L \bar{v}_x t}{R^2}} \frac{1}{\zeta} \exp \left(\frac{1}{\zeta} - \frac{\zeta}{4} \left(\frac{r}{2\alpha_L} \right)^2 \left(1 + \frac{4\lambda \alpha_L R}{\bar{v}_x} \right) \right) d\zeta,
\end{aligned}$$

ahol $r^2 = x^2 + \frac{\alpha_L}{\alpha_T} y^2$. Az integrál megoldása a Hantush-függvényhez vezet, amelyet csak numerikusan lehet megoldani, de jó analitikus közelítő megoldása is ismert:

$$C(x, y, t) = \frac{\bar{C}_0}{4\sqrt{\pi \alpha_T}} \exp \left(\frac{x - r\gamma}{2\alpha_L} \right) \frac{1}{\sqrt{r\gamma}} \operatorname{erfc} \left(\frac{r - \frac{\bar{v}_x t \gamma}{R}}{2\sqrt{\frac{\alpha_L \bar{v}_x t}{R}}} \right), \quad (2.48.)$$

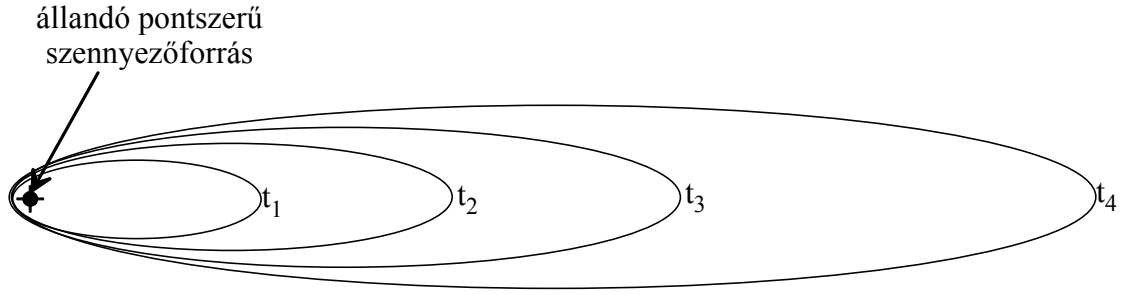
$$\text{ahol } \bar{C}_0 = \frac{\dot{M}}{n_0 m \bar{v}_x} \text{ és } \gamma = \sqrt{1 + \frac{4\alpha_L \lambda R}{\bar{v}_x}}.$$

A közelítő megoldás pontossága $\frac{r}{2\alpha_L} > 1$, akkor kb.10%, de ha $\frac{r}{2\alpha_L} < 1$, akkor 1%. A (2.48.) egyenlettel számítható koncentráció eloszlás alakját a 18. ábra mutatja be.

2.2.2. Numerikus megoldások

2.2.2.1. Véges differencia módszer

A véges differencia módszer alkalmazása során a hidrodinamikai alkalmazásnál látottakhoz hasonlóan, a modellezett teret tetszőleges számú, egymással érintkező téglalaprak alakú elemekre bontjuk, egyenletes vagy változó osztású rácsáló segítségével. Mivel a hidrodinamikai modellezésnél kapott eredmények a transzportmodell bemeneti adatai, ezért célszerű mind a hidrodinamikai, mind a transzportmodellezéshez azonos rácsalót használni. Ezután a transzport-egyenletnek a differenciaegyenletre alakított formája alapján a meghatározzuk az egyes hasábelemek és az azokkal közvetlenül érintkező elemek közötti advektív és diszperzív szennyezőanyag fluxusokat, az adszorbeált és az esetlegesen kémiai vagy radioaktív bomlás útján degradálódott szennyezőanyag mennyiségeket. Figyelembe véve a szennyezőanyag-nyelők és források hatását, valamint alkalmazva a kezdeti és peremfeltételeket, felírjuk az egyes elemek szennyezőanyag-mérlegét egy a kezdeti t_0 időpontra és az azt követő Δt időpontra. Ezt követően az egyes elemek anyagmérlege alapján felállítjuk a modellezett tér szennyezőanyag forgalmát - az adott időlépcsőben - leíró lineáris egyenletrendszer, amit a korábban vázlatosan bemutatott matematikai eljárásokkal megoldunk. Eredményként az egyes elemekre vonatkozó koncentráció-értékeket kapunk. Nem permanens esetben az utóbbi lépéseket tetszőleges számú időlépcsőre megismétljük.

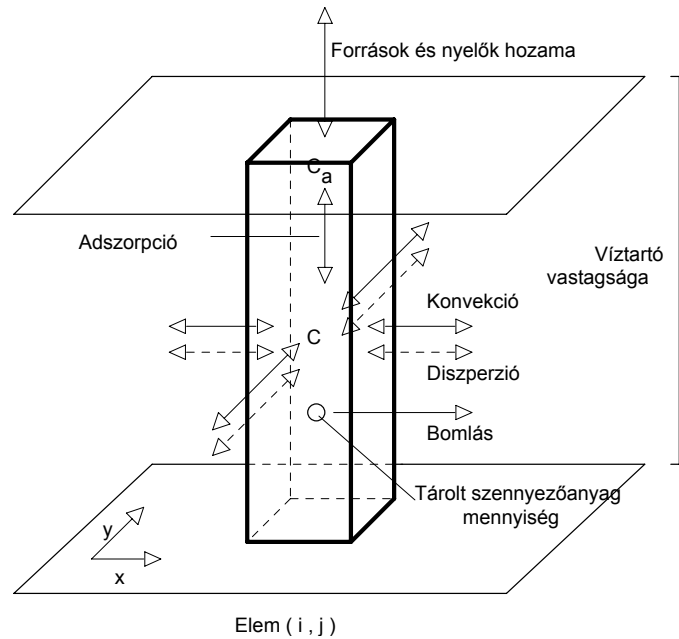


18. ábra

Állandó forrás okozta szennyezőanyag-eloszlás időbeli változása

A szennyezőanyag-mérleg elemei:

Az egyszerűség kedvéért tekintsünk egy síkmodell, amelyben a rácsháló osztása x és y irányban is egyenletes, Δx , illetve Δy . Legyenek a rácsháló elemeinek koordinátái x irányban 1,2,..., i-1,i,i+1,...n, míg y irányban 1,2,...,j-1,j,j+1,...n. így egy általános helyzetű elemre a koncentráció értéke $C_{i,j}$, az elem magassága $m_{i,j}$ és így tovább (19. ábra).



19. ábra

Szennyezőanyag-mérleg elemei egy kiválasztott elemi hasáb környezetében

Ha a pórusokban az áramlási sebesség komponensei (\bar{v}_x, \bar{v}_y) , akkor az oldott szennyezőanyagokat tartalmazó víztömeg áramlása következtében az egyes elemekbe be- illetve kilépő advektív szennyezőanyag hozamokat az alábbi egyenlet írja le:

$$J_k = \{ \bar{v}_{x,i-1,j} \cdot [\alpha \cdot C_{i-1,j} + (1-\alpha) \cdot C_{i,j}] \Delta y \cdot (m_{i-1,j} + m_{i,j}) - \bar{v}_{x,i,j} \cdot [\beta \cdot C_{i,j} + (1-\beta) \cdot C_{i+1,j}] \Delta y \cdot (m_{i,j} + m_{i+1,j}) + \bar{v}_{y,i,j-1} \cdot [\gamma \cdot C_{i,j-1} + (1-\gamma) \cdot C_{i,j}] \Delta x \cdot (m_{i,j-1} + m_{i,j}) - \bar{v}_{y,i,j} \cdot [\delta \cdot C_{i,j} + (1-\delta) \cdot C_{i,j+1}] \Delta x \cdot (m_{i,j} + m_{i,j+1}) \} / 2n_0 \quad (2.49.)$$

ahol $C_{i,j}$ a koncentráció az i,j hasábban és n_0 a szabad hézagterefogat.

Függően attól, hogy milyen módon képezzük a differenciákat α , β , γ és δ értéke az alábbiak szerint alakul:

- központi differenciák alkalmazása esetén: $\alpha = \beta = \gamma = \delta = 0,5$. (2.50.)

- előrelépéses differenciák esetén:

$$\alpha = \lfloor 1 + \text{sgn}(v_{x,i-1,j}) \rfloor / 2, \beta = \lfloor 1 + \text{sgn}(v_{x,i,j}) \rfloor / 2, \\ \gamma = \lfloor 1 + \text{sgn}(v_{y,i,j-1}) \rfloor / 2 \text{ és } \delta = \lfloor 1 + \text{sgn}(v_{y,i,j}) \rfloor / 2. \quad (2.51.)$$

- hátralépéses differenciák esetén:

$$\alpha = \lfloor 1 - \text{sgn}(v_{x,i-1,j}) \rfloor / 2, \beta = \lfloor 1 - \text{sgn}(v_{x,i,j}) \rfloor / 2, \\ \gamma = \lfloor 1 - \text{sgn}(v_{y,i,j-1}) \rfloor / 2, \delta = \lfloor 1 - \text{sgn}(v_{y,i,j}) \rfloor / 2. \quad (2.52.)$$

A három differenciaképzési eljárás közül, amennyiben az advektív transzport domináns az előrelépéses, amennyiben a diszperzív transzport a jellemző, a központi differenciákat felhasználó algoritmust javasolja KINZELBACH (1986) használni.

A szennyezőanyag hidrodinamikai diszperziója, illetve a molekuláris diffúzió következtében a kiválasztott hasábelem és a környezetében lévő elemek között áramló szennyezőanyag fluxus párhuzamos és diagonális diszperzív fluxusokból tevődik össze (20. ábra). Amennyiben az áramlás iránya megegyezik valamelyik (pl. x) tengellyel, akkor a diszperzív szennyezőanyag áramlásnak csak az elem falára merőleges illetve azzal párhuzamos (tehát a másik két oldalára merőleges) komponense van (párhuzamos fluxusok):

$$J_d^{(1)} = (D_{eff} + D_{xx,i-1,j}) \cdot (C_{i-1,j} - C_{i,j}) \left(\frac{\Delta y}{\Delta x} \right) \cdot (m_{i-1,j} + m_{i,j}) \frac{n_0}{2} - \\ - (D_{eff} + D_{xx,i,j}) \cdot (C_{i,j} - C_{i+1,j}) \left(\frac{\Delta y}{\Delta x} \right) \cdot (m_{i,j} + m_{i+1,j}) \frac{n_0}{2} + \\ + (D_{eff} + D_{yy,i,j-1}) \cdot (C_{i,j-1} - C_{i,j}) \left(\frac{\Delta y}{\Delta x} \right) (m_{i,j-1} + m_{i,j}) \frac{n_0}{2} - \\ - (D_{eff} + D_{yy,i,j}) \cdot (C_{i,j} - C_{i,j+1}) \left(\frac{\Delta y}{\Delta x} \right) (m_{i,j} + m_{i,j+1}) \frac{n_0}{2} \quad (2.53.)$$

Amennyiben az áramlási irány nem párhuzamos a koordináta tengelyekkel, a diszperzív hozamok számításánál az úgynevezett diagonális irányú diszperzív hozamokat is tekintetbe kell venni, amelyek a következő módon számíthatók:

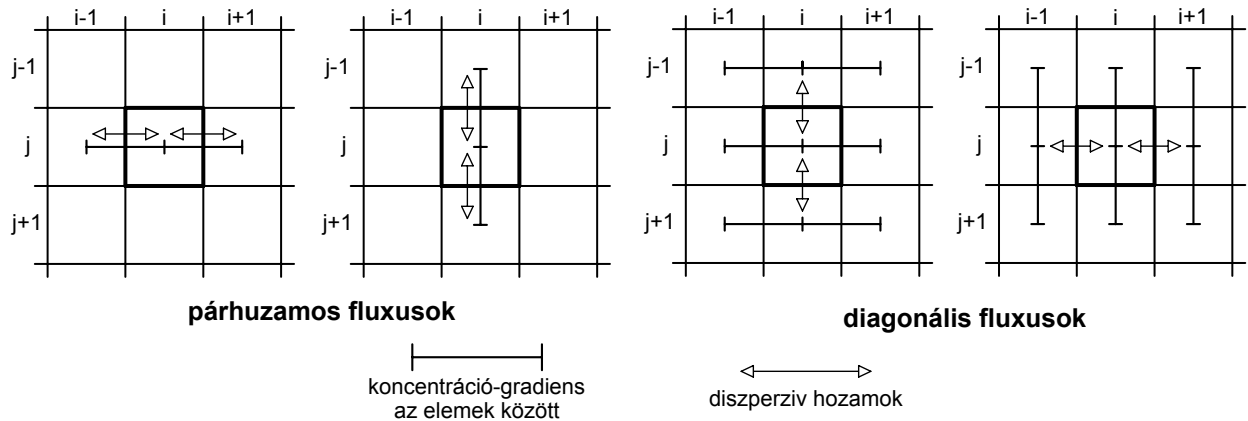
- Diagonális diszperzív hozam x irányból:

$$J_d^{(2x)} = (D_{eff} + D_{xy,i,j}) (C_{i,j+1} - C_{i,j-1} + C_{i+1,j+1} - C_{i+1,j-1}) \cdot (m_{i,j} + m_{i+1,j}) \frac{n_0}{8} - \\ - (D_{eff} + D_{xy,i-1,j}) (C_{i-1,j+1} - C_{i-1,j-1} + C_{i,j+1} - C_{i,j-1}) \cdot (m_{i-1,j} + m_{i,j}) \frac{n_0}{8} \quad (2.54.)$$

- Diagonális diszperzív hozam y irányból:

$$J_d^{(2y)} = (D_{eff} + D_{yx,i,j}) (C_{i+1,j} - C_{i-1,j} + C_{i+1,j+1} - C_{i-1,j+1}) \cdot (m_{i,j} + m_{i,j+1}) \frac{n_0}{8} - \\ - (D_{eff} + D_{yx,i,j-1}) (C_{i+1,j-1} - C_{i-1,j-1} + C_{i+1,j} - C_{i-1,j}) \cdot (m_{i,j-1} + m_{i,j}) \frac{n_0}{8} \quad (2.55.)$$

ahol D_{xx} , D_{yy} , D_{xy} és D_{yx} a diszperzió-állandó tenzor elemei, amelyeket a (2.9.) összefüggések segítségével számíthatunk.



20. ábra

A párhuzamos és diagonális diszperzív hozamok értelmezése

A korábbiak alapján tehát a diszperzív hozamok fluxusa $J_d = J_d^{(1)}$, ha az uralkodó áramlási sebesség iránya párhuzamos bármelyik koordináta tengellyel és $J_d = J_d^{(1)} + J_d^{(2x)} + J_d^{(2y)}$ általános irányú sebességvektor esetén.

Az egyes elemek szennyezőanyag mérlegét az elemen belüli szennyezőanyag források és nyelők (pl. termelő kutak) hozamai módosíthatják, amelyeknek két alapvető típusa van: a koncentrált és a területi források.

A vízkitermeléshez illetve vízbetápláláshoz kötött koncentrált források és nyelők fluxusa

$$J_q^{(1)} = q_{i,j} \cdot \Delta x \Delta y \cdot C_{kut,i,j}, \quad (2.56.)$$

ahol $C_{kut,i,j}$ a kúttal kitermelt vagy a kútba injektált víz koncentrációja, $q_{i,j}$ a betáplálás/kivétel hozama az elem egységnyi felületére vetítve. A területen megoszló - ú.n. belső - szennyezőanyag források (pl. depóniák) esetében a fluxus

$$J_q^{(2)} = S_{belső,i,j} \cdot \Delta x \Delta y, \quad (2.57.)$$

ahol $S_{belső,i,j}$ [mg/s/m²] a belső forrás (depónia) aktivitásának az értéke a hasábelem egységnyi területére vonatkoztatva.

A szennyezőanyagok egy része biológiai, kémiai vagy radioaktív úton lebomlik. A degradáció során a rendszerből távozó anyagmennyiség fluxusa

$$J_{deg} = -\lambda \cdot n_0 \cdot \Delta x \Delta y \cdot m_{i,j} \cdot C_{i,j}, \quad (2.58.)$$

ahol λ a bomlási együttható, $C_{i,j}$ a koncentráció az elemben az időlépcső kezdetén.

A lineáris adszorpció figyelembevételére a be- és kifolyó hozamokat az R késleltetési tényezővel osztjuk el. Amennyiben az adszorpciót nem kívánjuk figyelembe venni, akkor $R=1$.

A korábban felsorolt szennyezőanyag-hozamok hatására az adott időlépcső alatt a vizsgált elemben a koncentráció, tehát a tárolt szennyezőanyagok

$$M_t = n_0 \cdot \Delta x \Delta y \cdot m_{i,j} [C_{i,j}(t + \Delta t) - C_{i,j}(t)] \quad (2.59.)$$

mennyisége megváltozik. Alkalmazva a korábban felírt összefüggéseket, a szennyezőanyag-mérleg kétdimenziós áramlás (síkszivárgás) esetén az alábbi módon fogalmazható meg:

$$\frac{J_k + J_d + J_q^{(1)} + J_q^{(2)} + J_{deg}}{R} \cdot \Delta t = M_t. \quad (2.60.)$$

Ez az egyenlet minden egyes hasábelemre felírható, így a probléma megoldását egy sok-ismeretlenes egyenletrendszer megoldására vezettük vissza.

A szennyezőanyag-mérleg valódi háromdimenziós esetben kissé módosul, mert ekkor a kiválasztott elem nemcsak a korábban figyelembe vett szomszédos négy elemmel, hanem az alatta és felette elhelyezkedő elemekkel is kapcsolatban áll. Ebben az esetben az advektív hozamokat a függőleges áramlási sebességet is figyelembe véve újabb tagokkal bővíteni kell. A diszperzív hozamokat a diszperziós tenzor 3x3 méretű

mátrixának segítségével kell felírni, további normális és diagonális tagokkal bővítve a korábban alkalmazott összefüggést. A források és nyelők hozamai, a degradáció okozta koncentráció-csökkenés, valamint az adszorpció figyelembevétele nem változik.

A kezdeti és peremfeltételek megadása

A modell tér- és időbeli határain a szennyezőanyag-mérleg néhány eleme meghatározatlan, ezek meghatározására perem- és kezdeti feltételeket szükséges alkalmazni.

Ahhoz, hogy az első időlépcső során a szennyezőanyag hozamok meghatározhatók legyenek, kezdeti feltételként a t_0 időponthoz tartozó koncentráció-értékeket használjuk fel. Ezek után már minden $t_i = t_{i-1} + \Delta t$ időlépcsőre felírható az egyenletrendszer, ahol i az időlépcső sorszáma.

A modellezett térrész határain a szennyezőanyag-mérleg hiányzó elemeinek pótlásra, vagy ezen összetevők számításának lehetővé tételére Dirichlet-típusú vagy Neumann-típusú peremfeltételeket alkalmazhatunk. *Dirichlet-típusú peremfeltétel* esetén az adott szélső hasáblemben (függetlenül az elem szennyezőanyag-mérlegének alakulásától) a koncentrációt időlépcsőről időlépcsőre állandónak vagy egy szabály szerint változónak tekintjük. Leggyakrabban a szennyezőforrástól megfelelően távol lévő határelemekben alkalmazzuk, oly módon, hogy az állandó koncentráció értékét zérusnak, vagy a háttérterhelésnek megfelelő értékűnek választjuk. *Neumann-típusú határ* esetén a beáramló szennyezőanyag-fluxus értékét tekintjük állandónak, azaz a peremi helyzetű elembe a modellezett téren kívülről beáramló szennyezőanyag advektív és diszperzív fluxusait, egy adott, meghatározott értékű fluxussal helyettesítjük. Speciális esete, amikor a beáramló szennyezőanyag-hozam zérus.

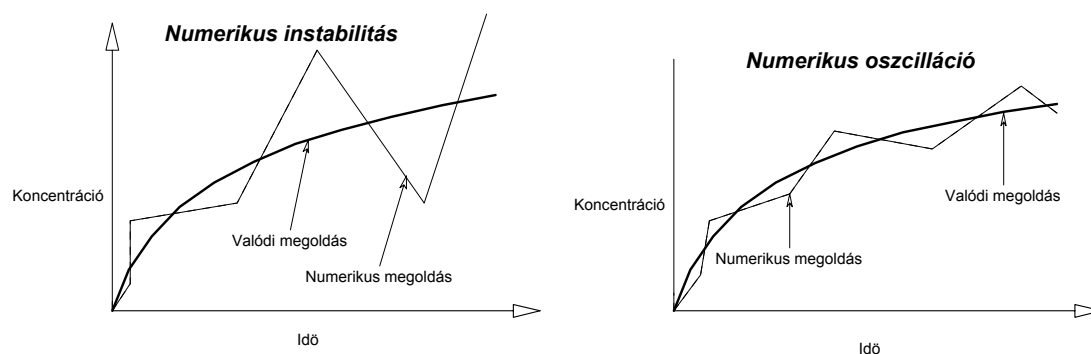
2.2.2.2. A transzport egyenlet numerikus megoldásainak hibái

Ugyanúgy, mint a szivárgás alapegyenletének megoldásakor, a transzport-egyenlet numerikus megoldásakor is felléphetnek hibák. A megoldás közelítő voltát a továbbiakban sem tekintjük a megoldás hibájának.

2.2.2.2.1 A megoldás instabilitása

Mivel az időbeli folyamatok követésére mind a végeselem, mind a véges differencia módszer véges differenciákat használ, éppúgy, mint ahogy azt a szivárgási alapegyenlet megoldásánál láttuk, ezért a numerikus hibák is azonosak.

A *megoldás instabilitásán* azt értjük, hogy a közelítő megoldás a valódi megoldáshoz nem konvergál (21. ábra). Az instabilitás jelensége elsősorban explicit megoldási módok esetén jelentkezik, azonban az elemszám növekedésével, elsősorban háromdimenziós numerikus modellek és/vagy implicit megoldó rutinok használata esetén is előfordul. Az instabilitás egyik speciális esete a *numerikus oszcilláció*, amikor a számítások eredményei nem képesek a hibahatáron belül közelíteni a valós megoldást. A stabilitás biztosítása érdekében a Courant, a Neumann és a forrás-nyelők stabilitási kritériumoknak kell teljesülniük.



21. ábra

A numerikus instabilitás és a numerikus oszcilláció jelensége
a transzportmodellezésnél

A *Courant kritérium* azt fejezi ki, hogy advektív úton az adott Δt időlépcső alatt nem léphet ki több szennyezőanyag az elemből, mint amennyi az időlépcső kezdetén az elembe tárolt anyagmennyiség. Ennek a feltételnek a modellezett tér minden elemére, minden időlépcső során teljesülnie kell. A Courant kritériumot az (2.61.) egyenlet írja le, azonban előrelépési differenciák alkalmazása esetén a $Co_x + Co_y \leq 1$ feltételnek is

teljesülnie kell, ahol Co az úgynevezett *Courant-szám*, v_x és v_y a Darcy-féle áramlási sebességvektor komponensei, Δx és Δy a vizsgált elem hossza, illetve szélessége.

$$Co_x = \left| \frac{\Delta t \cdot v_x}{\Delta x} \right| \leq 1, Co_y = \left| \frac{\Delta t \cdot v_y}{\Delta y} \right| \leq 1. \quad (2.61.)$$

Háromdimenziós modellek esetén a Courant kritérium a

$$Co = \left| \frac{\Delta t \cdot v(x, y, z)}{\Delta l} \right| \leq 1 \quad (2.62.)$$

formában írható fel, ahol Δl az adott elemen belüli áramvonalak sebességirányban mért maximális hossza (KÖNIG, 1993).

A *Neumann kritérium* azt biztosítja, hogy kizárólag az advektív-diszperzív szennyezőanyag-hozamok hatására a koncentráció-gradiens iránya ne változhasson meg. Matematikai formában:

$$\frac{D_{xx}^* \Delta t}{(\Delta x)^2} + \frac{D_{yy}^* \Delta t}{(\Delta y)^2} \leq 0,5, \quad (2.63.)$$

ahol D_{xx}^* és D_{yy}^* a diszperzió-állandó mátrixának főátlójában található elemei (REDDEL és SUNADA, 1970).

A forrás- és nyelő-elemek stabilitási kritériuma biztosítja, hogy a nyelők hatására bekövetkező szennyezőanyag-mennyiség csökkenése ne legyen nagyobb, mint az időlépcső elején az adott elemekben tárolt szennyezőanyag-mennyiség, azaz

$$\Delta t \leq \frac{n_0 m_{i,j}}{q_{i,j}}, \quad (2.64.)$$

ahol $q_{i,j}$ a pontszerű nyelők és források összegzett hozama az elem egységnyi felületére vetítve, $m_{i,j}$ az elem (átlagos) magassága, n_0 a szabad hézagterefogat.

2.2.2.2.2 A numerikus diszperzió

Numerikus diszperzió alatt a szennyezőanyag pusztán advektív transzportja során kialakuló éles frontjának - az iteratív számítási ciklusok sorozatának végrehajtása közben fellépő pontatlanságok hatására bekövetkező - elmosódását értjük (22. ábra:a).

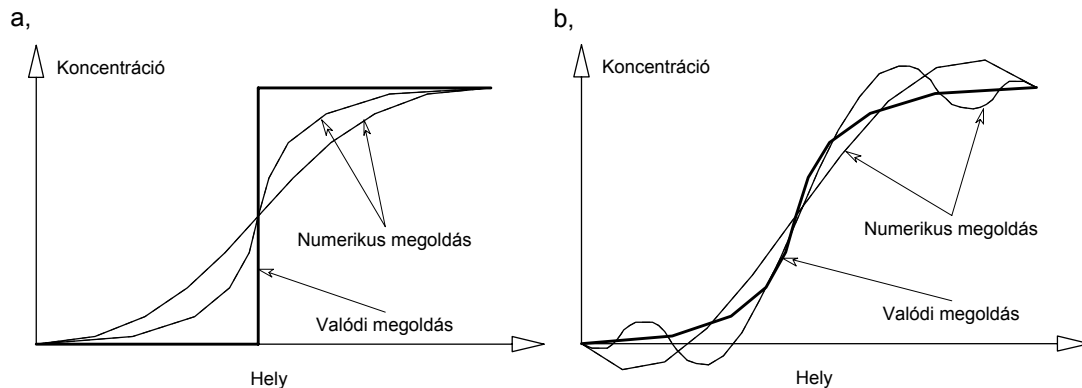
A jelenség kialakulásának oka, hogy a szennyezési front számított haladási sebessége kissé eltér az advektív áramlási sebességtől. Mivel a numerikus módszerek alkalmazásakor az anyagmérleg mindig pontosan teljesül, ezért a sebességbeli eltérés a rendszerben egy relatív koncentráció-csökkenéssel kompenzálódik, így az oldat és a kiszoruló víz közötti éles határvonal elmosódik és egy átmeneti zóna alakul ki (HALÁSZ, 1987). Minthogy a hibajelenség eredménye a szennyezőanyag szóródása, ezért numerikus diszperciónak nevezik. Az említett hiba bizonyíthatóan fellép advektív-diszperzív transzportszámításoknál is, amelynek eredményeként látszólagosan megnövekednek a diszperzió-állandó tenzorának elemei. Magát a hibát a differenciálhányadosok differenciahányadossal való közelítésének pontatlansága okozza, ami a második deriváltak (diszperzív hozamok) esetén sokkal nagyobb jelentőségű.

2.2.2.2.3 Az "Undershoot-Overshoot" jelenség

Az "*Undershoot-Overshoot*" jelenség hasonlít a numerikus oszcillációhoz, ekkor a két különböző koncentrációjú hely között a koncentráció érték nem fokozatosan, hanem az alacsony és a magas koncentrációértékekhez oszcillálva közelít (22. ábra:b). A jelenség elsősorban a központi differenciák alkalmazásakor fordul elő, így az előrelépéses differenciákra való áttéréssel megkerülhető. Ez utóbbi esetben azonban a numerikus diszperzió erősebb, mert az ilyen módon képzett differenciahányados nagyobb hibával közelíti a differenciálhányadost, mint a központi differenciák esetén.

A numerikus diszperzió és az "Undershoot-Overshoot" jelenség elkerülhető, ha a korábban tárgyalt Courant-kritérium a modellezett tér teljes egészére, mindkét (mindhárom) koordináta-tengely irányában teljesül, és ha a hálóra értelmezett Peclet szám kisebb, mint 2 (FRIND, 1982):

$$Pe_x = \frac{\bar{v}_x \Delta x}{D_{xx}^*} \leq 2 \quad \text{és} \quad Pe_y = \frac{\bar{v}_y \Delta y}{D_{yy}^*} \leq 2, \quad (2.65.)$$



22. ábra

A numerikus diszperzió és az "Undershoot-Overshoot" jelenség

ahol Pe a Peclet-szám.

Sajnos a kritériumok teljesülése csak magas elemszám esetében biztosítható, azonban ennek korlátot szab a rendelkezésre álló memória. KINZELBACH (1986) arra hívja fel a figyelmet, hogy az említett numerikus hibák

még a fenti feltételek teljesülése esetén is bekövetkezhetnek, ha $\frac{\alpha_L}{\alpha_T} > \approx 10$, ahol α_L és α_T a longitudinális és transzverzális diszperzivitás.

3. Transzportparaméterek laboratóriumi meghatározása

Mint azt a korábban leírtak bemutatják a különböző szennyező komponensek transzportjának számításához a szivárgás hidraulikájának (1. fejezet) és a szennyezőanyag transzport törvényszerűségeinek (2. fejezet) ismeretén túl a szennyezőanyag és közegspecifikus transzportparaméterek meghatározására is szükség van. Sajnos a transzportparaméterek közül a diszperzivitás a vizsgált probléma léptékétől függő paraméter, ezért csak a természeteshez hasonló vagy azzal azonos léptékű kísérlettel határozható meg, azonban az effektív diffúzióállandó, továbbá a kis léptékű hidrodinamikai diszperzió, továbbá a késleltetés, a közegbeli bomlási állandók, illetve ezek alapján a szorpciós izoterma paraméterek egyaránt laboratóriumi kísérletekkel is meghatározhatók.

3.1. Néhány a szakirodalomból ismert laboratóriumi mérési megoldás és néhány jellemző szennyező komponens szakirodalmi adata

3.1.1. A szennyezőanyag szóródásának mértékét befolyásoló tényezők

A szennyezőanyag szóródásának mértékét meghatározó tényezők az effektív diffúzió-állandó, a hidrodinamikai diszperzió-állandó, a diszperzivitás és a diszperzió-állandó.

A diffúzió által szállított anyagmennyiséget a vizes oldatban mért diffúzió-állandó és az azzal arányos közeg- és szennyezőanyag-specifikus effektív diffúzió-állandó határozza meg. Az effektív diffúzió-állandó mérésére alkalmas berendezést nagy mintákra BARONE és szerzőtársai (1990), kis méretű mintákhoz SKAGIUS és NERETNIEKS (1986) és WADDEN és KATSUBE (1982) készítettek. Az effektív diffúzió-állandó és a vizes közegben mért diffúzió-állandó közötti kapcsolatot egy szorzótényezővel (impedancia-faktor) is figyelembe vehetjük:

$$\gamma_i = \frac{D_{eff}}{D_0} \quad (3.1.)$$

Ennek a szorzónak a nagyságát tapasztalati úton LEGE és szerzőtársai (1996) határozták meg néhány anyagra (3.1. táblázat).

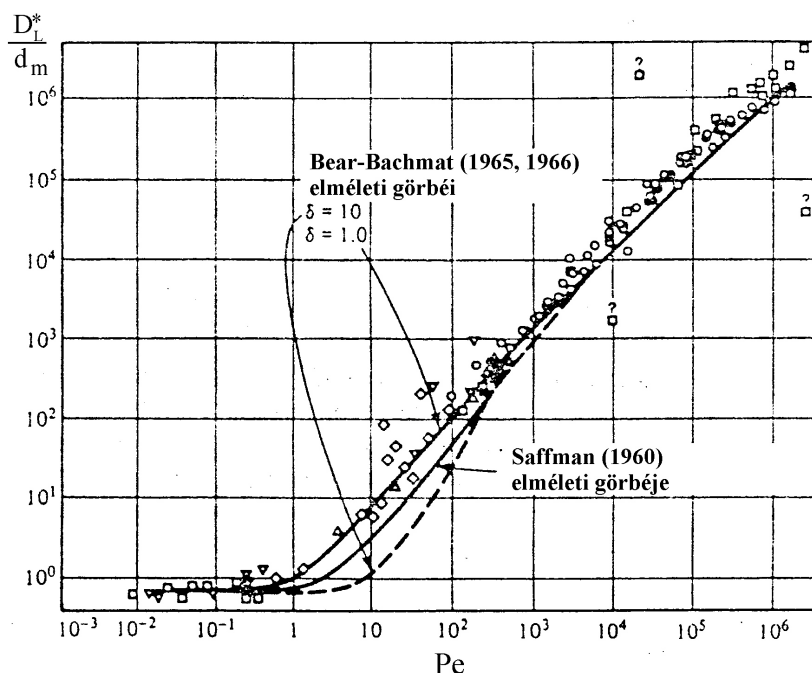
A hidrodinamikai diszperzió-állandó és a diszperzivitás - mint azt a 2. fejezetben tárgyaltuk - egymásból származtatható mennyiségek, a különböző számítási rendszerek - eltérő megfontolások alapján - mindkettőt

gyakran használják. A két paraméter határozza meg a szennyezőanyagnak a lokális sebességvektor irányának és nagyságának hatására bekövetkező szóródását, a hidrodinamikai diszperzió mértékét. A hidrodinamikai diszperzió fogalmába ugyanakkor nem fér bele a diffúzió miatti anyagvándorlás. Mivel a hidrodinamikai diszperzió-állandó a szivárgási sebességgel kapcsolatos mennyiség, és a szennyezőanyagok terjedésének mértéke a szivárgás sebességére merőlegesen és azzal azonos irányban eltérő, ezért megkülönböztetünk longitudinális és transzverzális hidrodinamikai diszperzió-állandót és diszperzivitást.

3.1. táblázat

<i>A vízben mért diffúzió-állandó és az effektív diffúzió-állandó aránya néhány képződmény esetén (LEGE et al., 1996.)</i>		
Impedancia-faktor	Anyag	Forrás
$0,02 > \gamma_i > 0,5$	kezeletlen agyagok	DGEG - GDA (1993)
$0,01 > \gamma_i > 0,5$	konzervatív szennyezőanyagok kezeletlen közegben	Fetter (1988)
$0,3 > \gamma_i > 0,5$	laza képződmények	Wienberg - Förstner (1994)
$\gamma_i > 0,1$	erősen tömörített agyagok	Wienberg - Förstner (1994)
$0,002 > \gamma_i > 0,03$	speciális tömítőanyag részfalazáshoz	Wienberg - Förstner (1994)

BEAR és VERRUIJT (1987) a hidrodinamikai diszperzió-állandó és a diffúzió-állandó kapcsolatát vizsgálta. A szivárgási sebességtérben vizsgálva a D_L longitudinális hidrodinamikai diszperzió-állandó és a D_{eff} effektív diffúzió-állandó arányát egy jól látható grafikus függvénykapcsolatot határozott meg, a $Pe = v \cdot d_m / D_{eff}$ összefüggéssel értelmezett Peclet-szám függvényében, ahol v a szivárgás lineáris (Darcy-féle) sebessége és d_m a mértékadó szemcseátmérő (23. ábra). A görbe alapján ismert D_{eff} effektív diffúzió-állandó, mértékadó szemcseátmérő és Darcy-féle szivárgási sebesség esetén a D_L longitudinális hidrodinamikai diszperzió-állandó meghatározható.



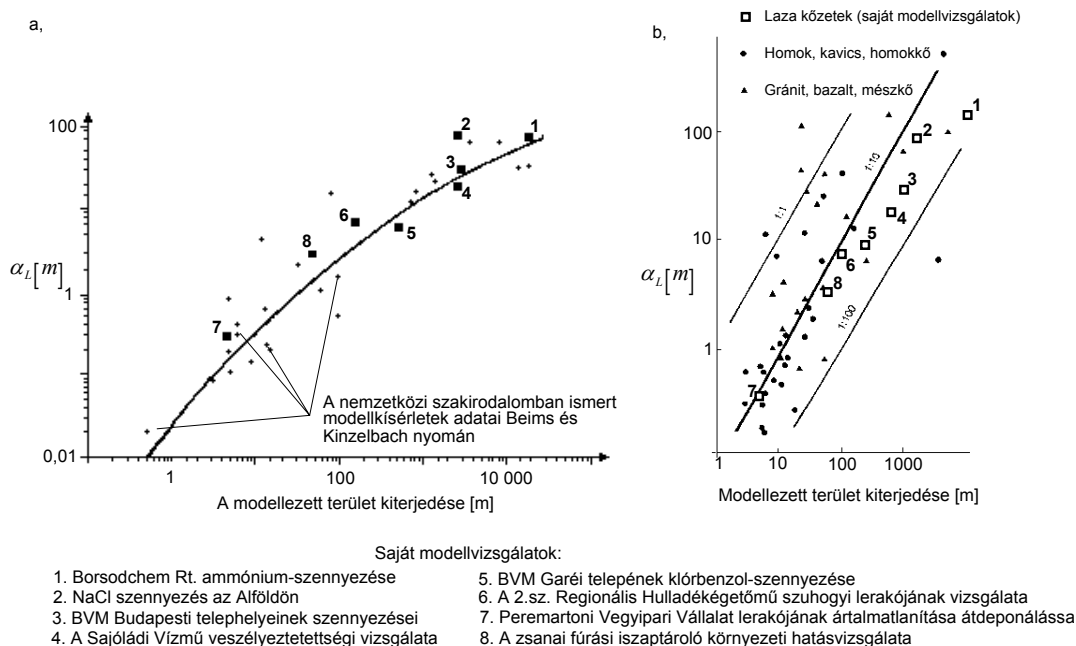
23. ábra

A longitudinális hidrodinamikai diszperzió-állandó és az effektív diffúzió-állandó aránya a Peclet-szám függvényében (BEAR-VERRUIJT, 1987.)

KINZELBACH (1986) - BEIMS (1983) adatai alapján végzett - elemzése korrelációt mutat ki a modellezett tér kiterjedése és a jellemző longitudinális diszperzivitás értéke között (Hiba! A hivatkozási forrás nem található.). Valójában a diszperzivitás értéke azonban nem a modellezett tér kiterjedésével, hanem a szennyezőanyag által

megtett útvonal maximális hosszával, a vizsgált jelenség léptékével van kapcsolatban, amit a továbbiakban a vizsgálati szakasz hosszának nevezünk.

Hasonló eredményre jutott az amerikai Water Science and Technology Board of the National Research Council (1990), amikor a transzportmodell-vizsgálatokat elemző, összegző jelentést készített. Az elemzés kiterjedt mind a porózus, mind a repedezett közegbeli szennyezőanyag-terjedési számításokra. Az adatrendszerek vizsgálata során megállapították, hogy a vizsgálati szakasz hossza és a longitudinális diszperzivitás értéke között 10:1 arány jellemző. Ugyanakkor, mint az a 24. ábra látható, a korreláció szorossága a kis modellméretek esetén megfelelő, nagyobb modellek esetén egyre kevésbé. Ennek az az oka, hogy a longitudinális diszperzivitás és a vizsgálati szakasz hossza közötti kapcsolat nem lineáris, nagyobb kőzettestek modellezése esetén az arányszám akár 100:1 is lehet.



24. ábra

A longitudinális diszperziós tényező és a vizsgálati szakasz nagysága közötti összefüggés (KINZELBACH, 1986. és WATER SCIENCE AND TECHNOLOGY BOARD, 1990. nyomán)

A diszperzió-állandó nagysága utal a szennyezőanyag szóródását előidéző valamennyi folyamat által szállított összes anyagmennyiségre, azaz értéke az effektív diffúzió-állandó és a hidrodinamikai diszperzió-állandó összege. Mivel a diszperzió-állandó magában foglalja a hidrodinamikai diszperzió-állandót is, ezért megkülönböztetünk longitudinális és transzverzális diszperzió-állandót.

A longitudinális diszperzió-állandó mérésére PONGRÁCZ (1981) és UJFALUDI (1985) is készített egy oszlopkísérleten alapuló berendezést. UJFALUDI a berendezést desztillált vízzel telítette, majd a folyadékot jelzőanyagra (0,12% NaCl oldat) cserélte ki. Az x_0 mélységben lévő vezetőképesség-mérő szondával mérték a transzport-folyamat előrehaladását. A D_L^* diszperzió-állandót a FRIED és COMBARNOUS (1971) képletével számították:

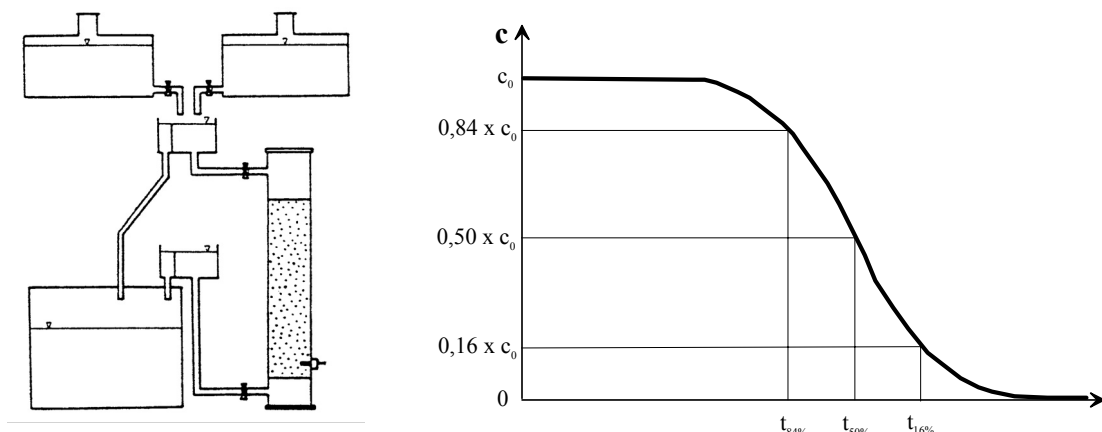
$$D_L^* = \frac{1}{8} \left[\frac{x_0 - vt(16)}{t(16)} - \frac{x_0 - vt(84)}{t(84)} \right]^2, \quad (3.2.)$$

ahol x_0 a teljes úthossz, v a lineáris szivárgási sebesség, $t(16)$ és $t(84)$ a 16 és 84%-os relatív koncentráció-értékekhez tartozó beérkezési idő (25. ábra).

PONGRÁCZ (1981) a transzverzális diszperzió-állandó mérésére is szerkesztett egy kísérleti berendezést (26. ábra), ahol egy áramlási iránnyal párhuzamos elválasztófal mentén egy zérus és egy állandó koncentrációjú folyadékot szivárogtatott a mintán keresztül. Ekkor is a

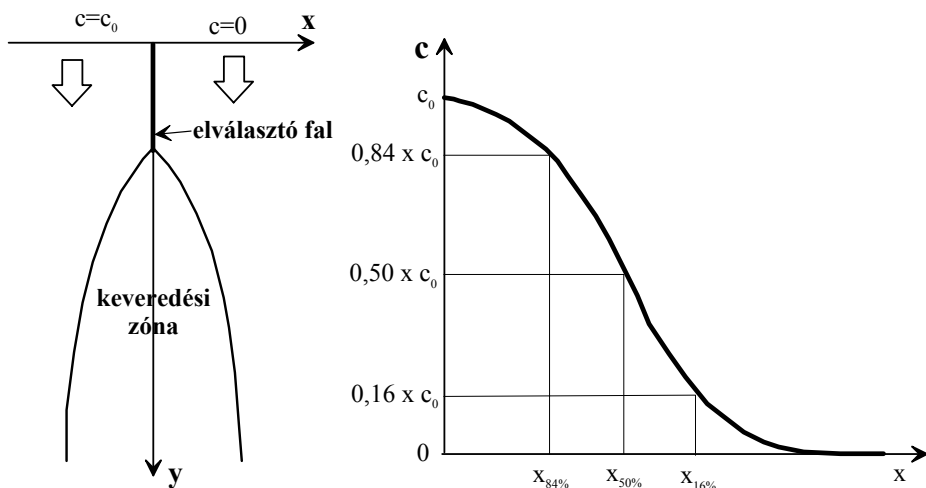
$$D_T^* = \frac{(X_{0,16} - X_{0,84})^2}{8t} \quad (3.3.)$$

képlet alkalmazható, de ebben az esetben a szivárgás y irányú.



25. ábra

A diszperziós koefficiens mérésére szolgáló Ujfaludi-féle berendezés, koncentráció-eloszlás longitudinális diszperzió esetén (UJFALUDI, 1985. és PONGRÁCZ, 1981.)



26. ábra

A transzverzális diszperzió-állandó mérése (PONGRÁCZ, 1981.)

A diszperzió-állandót egy oszlopkísérlet esetén az áttörési görbe érintőjének meredeksége alapján is meg lehet határozni (RIFAI et al. 1956 [cit. van GENUCHTEN – WIRIENGA, 1986.]). A szerzők levezették, hogy a longitudinális diszperzió-állandó

$$D_L^* = \frac{vL}{4\pi E^2} \quad (3.4.)$$

összefüggéssel számítható, ahol v a folyadék lineáris szivárgási sebessége, L az oszlop magassága és E az áttörési görbe érintőjének meredeksége egységnyi pórustérfogatnyi effluens esetén (KREMPER, 1998.).

A transzverzális és longitudinális diszperzió-állandó arányát FRIED és COMBARNOUS (1971.) szerint a 27. ábra mutatja be.

PERKINS és JOHNSTON (1963) a D_L^* longitudinális diszperzió-állandót vízrekesztő képződmények esetén az alábbi formulával javasolja kiszámítani:

$$D_L^* \left[\frac{m^2}{a} \right] = D_{eff} + 1,75 \cdot d_{50} [m] \cdot v \left[\frac{m}{a} \right], \quad (3.5.)$$

ahol d_{50} az átlagos szemcseátmérő.

A longitudinális diszperzió-állandó nagyságát homokminták vizsgálata alapján HARLEMAN, MELHORN és RUMER (1963.) az alábbi módon javasolja meghatározni:

$$D_L^* = 0,90 \div 2,18 \cdot v \cdot Re_{50}^{1,2} \quad (3.6.)$$

ahol v a folyadék kinematikai viszkozitása, Re_{50} a talaj d_{50} szemcseátmérőjéhez tartozó Reynolds-szám.

BRUCH és STREET (1967.) szerint durva homokok esetén a

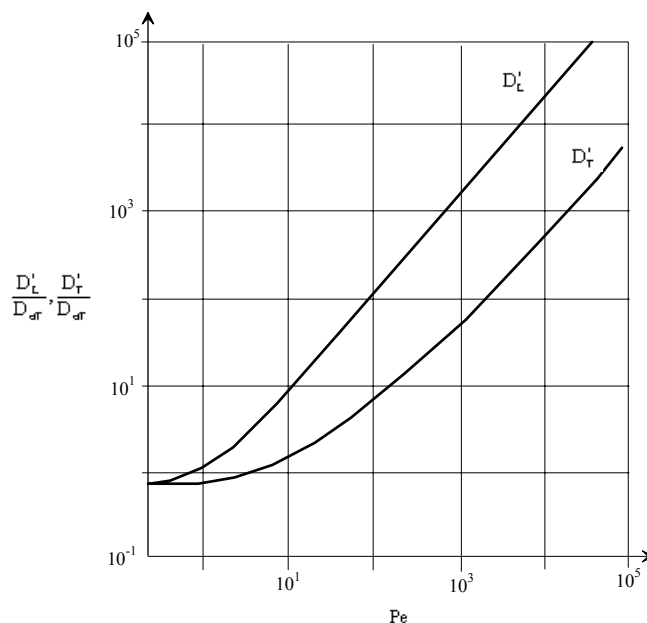
$$D_L^* = 1,8 \cdot \nu \cdot \text{Re}_{50}^{1,205} \quad (3.7.)$$

$$D_T^* = 0,11 \cdot \nu \cdot \text{Re}_{50}^{0,7} \quad (3.8.)$$

összefüggések érvényesek, ahol

$$\text{Re}_{50} = \frac{\nu d_{50\%}}{\nu}, \quad (3.9.)$$

ahol ν a szivárgás Darcy-féle sebessége, $d_{50\%}$ az 50 %-os szemcseméretre tartozó szemcseátmérő és ν a folyadék kinematikai viszkozitása (BOUWER, 1978.).



27. ábra

A transzverzális és longitudinális diszperzió-állandó összehasonlítása
(FRIED-COMBARNOUS, 1971.)

3.1.2. A szorpciós izotermák jellemzői, a megoszlási együttható és a késleltetés

A szorpciós izotermákat laboratóriumi mérésekkel kell a vizsgált szennyezőanyagra és közegre meghatározni. A laboratóriumi vizsgálat menetét a megfelelő talajtani szakkönyvek részletesen leírják. A megoszlási együttható a szorpciós izoterma érintőjének meredeksége, ami a valóságban a koncentráció függvényében folyamatosan változik. Amennyiben lineáris adszorpciót tételezünk fel, akkor a K_d megoszlási együttható alapján számítható a késleltetés:

$$R = 1 + \frac{K_d \rho_b}{n}, \quad (3.10.)$$

ahol ρ_b a közeg száraz állapotra vonatkoztatott sűrűsége és n a hézagterfogat.

A késleltetés (retardációs faktor, R) a következőképpen is értelmezhető:

$$R = \frac{v_p}{v_{c50\%}}, \quad (3.11.)$$

ahol v_p a víz pórusbeli átlagos szivárgási sebességének és $v_{c50\%}$ a szennyezőanyag-front előrehaladási sebességének az aránya. Az értelmezés szerint a késleltetés egy 1-nél nagyobb szám. (3.2. táblázat)

3.1.3. A bomlási együttható és a felezési idő

A szennyezőanyagok radioaktív bomlását a felezési idővel írjuk le. Az egyes izotópok felezési idejét jól ismerjük, ezeket a fontosabb fizikai alpművek tartalmazzák. A szerves vegyületek bomlása bekövetkezhet hidrolízis útján és biodegradációval, melyeket a λ bomlási állandóval vehetünk figyelembe. Néhány szerves vegyület bomlási állandóját a 3.3 és 3.4. táblázat tartalmazza.

3.2. táblázat

<i>A késleltetés nagysága néhány szerző szerint Czurda - Wagner (1988), Wagner (1992), Shackelford (1990), Czurda - Wagner (1991), Eggloffstein – Burkhardt - Mainka (1996)</i>		
Vizsgált anyag	Szennyezőkomponens	R
Karbonátmentes plasztikus agyag (Eisenberg)	Zn	3-6
Karbonátmentes plasztikus agyag, édesvízi molasz (Hinterschlagen)	Zn	5-9
Kvarter szalagos agyagmárga (Ravensburg)	Zn	10-20
Meszes, harmadidőszaki tengeri agyagmárga (Wiesloch)	Zn	10-20
Márga (Mühlacker)	Zn	~ 10
Márga (Mühlacker)	Cd	~ 7
Márga (Mühlacker)	Pb	~ 70
Illites-kaolinites agyag (Eisenberg)	Cd	6
Illites-kaolinites agyag (Eisenberg)	Cr	23-35
Illites-kaolinites agyag (Eisenberg)	Cu	6
Illites-kaolinites agyag (Eisenberg)	Pb	15-22
Illites-kaolinites agyag (Eisenberg)	Zn	5,2-7,5
Tömörített agyag (kaolinit)	Cl	1
Tömörített agyag (kaolinit)	K	26,3
Tömörített agyag (kaolinit)	Zn	92,7
Tömörített agyag (kaolinit)	Cd	371
Szalagos agyagmárga (Badener Tegel)	Sr	95-145
Szalagos agyagmárga (Badener Tegel)	Cs	48-78
Iszapos, agyagos talajok	Szervetlen és szerves kationok	3-80
Iszapos, agyagos talajok	Szervetlen és szerves anionok	2-5
Iszapos, agyagos talajok	Semleges, poláros szerves vegyületek	1-5
Iszapos, agyagos talajok	Semleges, apoláros szerves vegyületek	1-2

3.3. táblázat

<i>A szerves anyag talajban lejátszódó biodegradációjának intenzitása (MABEY - MILL, 1978)</i>					
Vegyület	Bomlási állandó [d ⁻¹]	Vegyület	Bomlási állandó [d ⁻¹]	Vegyület	Bomlási állandó [d ⁻¹]
Aldrin, dieldrin	0,013	Difenamid	0,123	Parakvát	0,0016
Atrazin	0,019	Fonofos	0,012	Pikloram	0,0073
Bromacil	0,0077	Glifoszfát	0,1	Simazin	0,014
Karbaril	0,037	Heptaklór	0,011	TCA	0,059
Karbofurán	0,047	Lindán	0,0026	Terbacil	0,015
DDT	0,00013	Linuron	0,0096	Trifluralin	0,008
Diazin	0,023	Malation	1,4	2,4-D	0,066
Dikamba	0,022	Metil-paration	0,16	2,4,5-T	0,035

3.4. táblázat

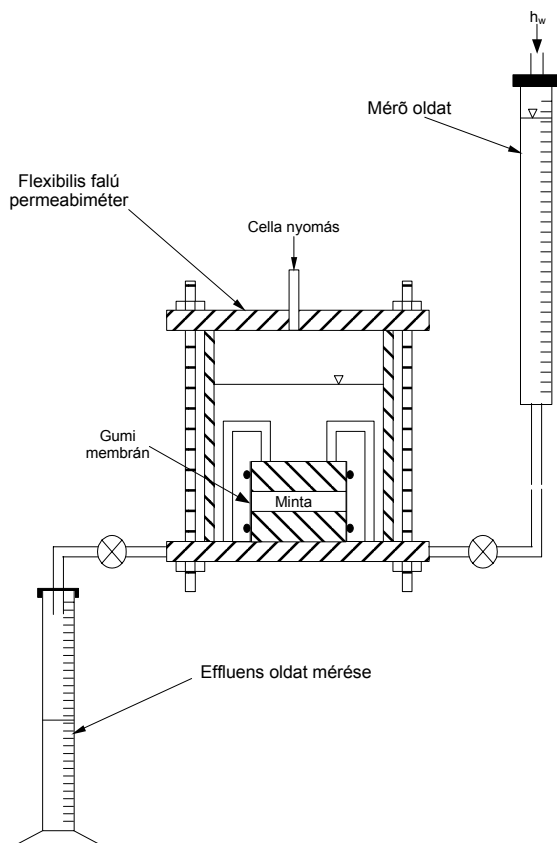
Néhány szerves vegyület hidrolitikus bomlásának intenzitása (DRAGUN, 1988)					
Vegyület	Felezési idő	Vegyület	Felezési idő	Vegyület	Felezési idő
acetamid	3950 év	dikloro-acetamid	0,73 év	jodometán	110 nap
atrazin	2,5 óra	dikloro-jodometán	275 év	2-jodopropán	2,9 nap
azirdin	154 nap	dikloro-metán	704 év	3-jodopropán	2 nap
benzol-klorid	16 mp	dikloro-metiléter	25 mp	izobutil-amid	7700 év
benzil-bromid	1,32 óra	dietil-metilfoszfónát	990 év	izopropil-bromid	2 nap
benzil-klorid	15 óra	dimetoxiszulfon	1,2 perc	izopropil-etanoát	8,4 év
benzilidén-klorid	0,1 óra	1,2-dimetil-epoxietán	15,7 nap	malation	8,1 nap
bromo-acetamid	21200 év	1,1-dimetil-epoxietán	4,4 nap	metoxi-acetamid	500 év
bromo-klorometán	44 év	difenil-foszfát	20,6 nap	n-metil-acetamid	38000 év
bromo-diklorometán	137 év	epoxietán	12 nap	metil-kloroetanoát	14 óra
bromoetán	30 nap	3,4-epoxi-ciklohexén	6 perc	metil-dikloroetanoát	38 perc
1-bromohexán	40 nap	3,4-epoxi-ciklooctán	52 perc	metil-epoxietán	14,6 nap
3-bromohexán	20 nap	etion	9,9 nap	metil-parathion	10,9 nap
bromometil-epoxietán	16 nap	n-etil-acetamid	70000 év	metil-trikloro-etanoát	<3,6 perc
1-bromo-3-fenil-propán	290 nap	etil-acetát	136 nap	monometil-foszfát	1 nap
1-bromopropán	26 nap	etil-butanoát	5,8 év	paration	17 nap
3-bromopropán	12 óra	etil-transz-butanoát	17 év	fenil-dikloroetanoát	3,7 perc
kloro-acetamid	1,46 év	etil-difluoro-ethanoát	23 perc	fenil-etanoát	38 nap
kloro-dibromoetán	274 év	etil-dimetil-etanoát	9,6 év	foszfonitril-haxamid	46 nap
kloroetán	38 nap	etil-metil-tioetanoát	87 nap	propadienil-etanoát	110 nap
kloro-fluoridometán	1 év	etil-fenil-metanoát	7,3 év	tetra-klorometán	7000 év
klorometán	339 nap	etil-propanoát	2,5 év	tribromometán	686 év
klorometil-epoxietán	8,2 nap	etil-propénoát	3,5 év	trikloro-acetamid	0,23 év
2-kloro-2-metilpropán	23 mp	etil-propinoát	17 nap	triklorometán	3500 év
2-kloropropén	2,9 nap	etil-piridil-metanoát	0,41 év	trikloro-etilbenzén	19 mp
3-kloropropén	69 nap	fluorometán	30 év	trietil-foszfát	5,5 év
ciklopentán-karboxamid	5500 év	2-fluor-2-metil-propán	50 nap	trietil-tiofoszfát	8,5 év
dibromoetán	183 év	hidroxi-metilpropán	28 nap		
1,3-dibromopropán	48 nap	jodoetán	49 nap		

3.2. Transzportparaméterek semi-automatikus laboratóriumi meghatározása

A késleltetés meghatározására egy új típusú laboratóriumi kísérletet állítottunk össze. A feladat agyagos képződmény transzport jellemzőinek meghatározása volt (SZABÓ et al., 2001.).

3.2.1. A VIZSGÁLATI MÓDSZER ISMERTETÉSE

Az általunk használt eljárás egy laboratóriumi oszlopkísérleten alapul. A mérés elrendezését a 28. ábra mutatja be. Kísérletünkhöz flexibilis falú permeabimétert használtunk, mely eredetileg főként agyagok szivárgási tényezőjének meghatározására szolgál. A berendezés, tökéletesen eleget tett a kísérlet elvégzéséhez szükséges kívánalmaknak, alkalmazásával egyidejűleg mérhető volt a minta szivárgási tényezője és a cinkviisszatartó képessége is.



28. ábra
A mérés vázlata

A mintából – a kísérleteket fúrési magmintákon végeztük – kb. 2.0-3.0 cm vastag hengereket készítettünk, ezeket a 28. ábrán látható módon építettük be a készülékbe. A minta alá és felé egyaránt szűrőt helyeztünk, hogy megakadályozza az apró talajszemcsék kimosódását. A kísérleti oldatnak a minta mellett történő „elfolyásának” megakadályozására egy gumi membrán szolgált, melyet a cella nyomás a minta oldalához présel így biztosítva, hogy az oldat teljes mennyisége a mintán áramoljon keresztül.

A permeabiméterben először a teljes telítődésig és a permanens szivárgási helyzet eléréséig desztillált vizes szivárgási tényező meghatározást végeztünk el $I=30$ hidraulikus gradiens mellett. Amint a telítődés befejeződött és a szivárgási tényező nagysága is beállt, a vizsgálati folyadékot 2500 ppm koncentrációban cink-ionokat tartalmazó oldatra cseréltük ki. Felfogva az átszivárgott oldatot, annak cink-ion koncentrációváltozásának mérésével követhető volt a minta telítődése. A permanens áramlási viszonyokat, a beszivárgó oldat állandó nyomáson tartásával biztosítottuk.

A szivárgási tényező meghatározása az alábbi képlet szerint történt:

$$k = \frac{a * l}{F * h_w} * \frac{\Delta h}{\Delta t} [m / s]; \quad (3.12.)$$

ahol: a , az oldattartó edény keresztmetszeti felülete [m^2]; l , a minta hossza [m]; F , a minta keresztmetszeti felülete [m^2]; h_w , az állandó nyomás értéke cm-ben [m]; Δh , fogyás cm-ben [m]; Δt , két leolvasás között eltelt idő [s].

Amint a szivárgási tényező nagysága is beállt, a vizsgálati folyadékot jelző- és mérőionokat tartalmazó folyadékra cseréljük ki. A kísérlet során 20 ppm koncentrációban lítium-ionokat és 2000 ppm koncentrációban cink-ionokat tartalmazó oldatot használtunk jelző-, illetve mérő-ionként. A vizsgálat felgyorsítására, a hidraulikus gradienst megnöveltük ($500 < I < 1000$). Ezután miközben az állandó koncentrációjú oldatot átszivárogtattuk a mintán, mértük az átszivárgó folyadék mennyiségét, a szivárgási tényezőt és az effluens oldatban a jelző- és a mérőkomponens (cink- és lítium-ion) koncentrációját.

A mintákat automata mintaváltóval (29. ábra) gyűjtöttük, majd atomabszorpciós spektrofotométerrel mértük a nehézfémkoncentrációt az egyes frakciókban.



29. ábra

Az effluens oldatok gyűjtése mintaváltóval történt

Az áttörési görbére az 1D oszlopkísérlet OGATA (1970.)-féle megoldásaként ismert függvényt illesztettük, melynek alapján a késleltetés és a diszperzió-állandó meghatározható volt.

A jelző lítium-ionok alkalmazását az indokolta, hogy ez az ion alig adszorbeálódik, illetve az esetleges megkötődés esetén bármely más ionnal azonnal lecserélődik és a pórusfolyadékba kerül, ezért gyakorlatilag késleltetés nélkül átjut a mintán. Így a lítium-ion koncentrációjának mérését egy, a kísérlet ellenőrzését lehetővé tevő vizsgálati tényezőnek tekinthetjük.

3.2.2. A számítás folyamata

Tekintsük a transzportegyenletet az alábbi alakban:

$$R \cdot \frac{\partial c}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - v \cdot \frac{\partial c}{\partial z} \quad (3.13.)$$

ahol c a pórusban észlelt koncentráció, t , az idő, z a hely, R a késleltetési tényező, D az effektív diffúzió állandó és v a szivárgás sebessége.

A megoldás kezdeti és peremfeltételei:

$$c(z, t)_{t=0} = 0 \quad z \in [0, \infty) \quad (3.14.)$$

$$c(z, t)_{z=0} = c_0 \quad t > 0 \quad (3.15.)$$

$$\frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z \rightarrow \infty} = 0 \quad t > 0 \quad (3.16.)$$

Az egyenlet eredeti megoldása z, t -re (OGATA, 1961):

$$c = c_0 \cdot \left[\frac{1}{2} \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{R \cdot z - v \cdot t}{\sqrt{D \cdot R \cdot t}} \right) + \frac{1}{2} e^{\frac{v \cdot z}{D}} \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{R \cdot z + v \cdot t}{\sqrt{D \cdot R \cdot t}} \right) \right] \quad (3.17.)$$

ahol c_0 a befolyó oldat koncentrációja.

Alkalmazzuk a következő transzformációkat:

$$t = \frac{x}{v} \text{ és } v \cdot t = x, \quad (3.18.)$$

ahol x az átfolyt víz térfogata.

Az illesztéshez használt függvényként a transzformált transzport-egyenletet használtuk fel:

$$c = \frac{c_0}{2} \cdot \left\{ \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{R \cdot z - \frac{x}{A}}{\sqrt{D \cdot R \cdot \frac{x}{v}}} \right) \right] + e^{\frac{v \cdot z}{A \cdot D}} \cdot \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{R \cdot z + \frac{x}{A}}{\sqrt{D \cdot R \cdot \frac{x}{v}}} \right) \right] \right\} \quad (3.19.)$$

3.2.3. A számítási eredmények és értékelésük

A pórus sebességgel számolt (és mértékegység helyes illesztés) eredményeit a 3.5. táblázatban foglaltuk össze:

3.5. táblázat:

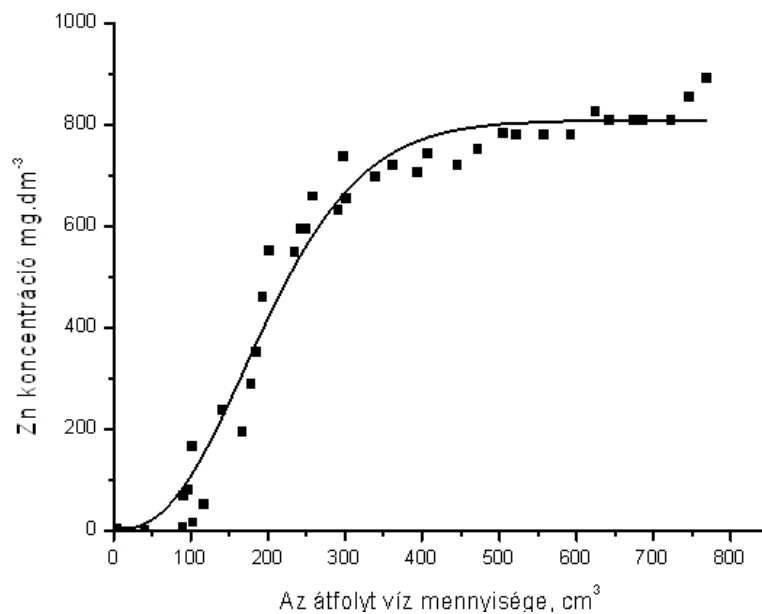
<i>A számított és mért cink-transzport paraméterek</i>				
<i>Paraméter leírása</i>	<i>Mértékegysége</i>	<i>Paraméter jele</i>	<i>Érték</i>	<i>Hiba</i>
Retardációs faktor	-	R	1.84	0.11
Diszperziós koefficiens	$\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	D	$2.00 \cdot 10^{-8}$	$3.52 \cdot 10^{-9}$
A vízáramlás sebessége	$\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$	v	$8.74 \cdot 10^{-6}$	-
A minta vastagsága	cm	z	1.5	-
Bemenő koncentráció	$\mu\text{g} \cdot \text{cm}^3$	c_0	808	14.4
Korreláció	-	R^2	0.974	-

ahol nincs hiba feltüntetve, ott mért paraméterről van szó.

A kapott függvényt és a mért áttörési görbét a 30. ábra mutatja be.

A kapott retardációs faktor értékekből látszik, hogy a cink áramlási sebessége, a telített talajban, még ilyen nagy koncentrációk esetében is legalább 1.84-ed része a víz áramlási sebességének.

A vizsgálatot más területen króm-szennyezés terjedési paramétereinek meghatározására is elvégeztük (3.6. és 3.7. táblázatok).



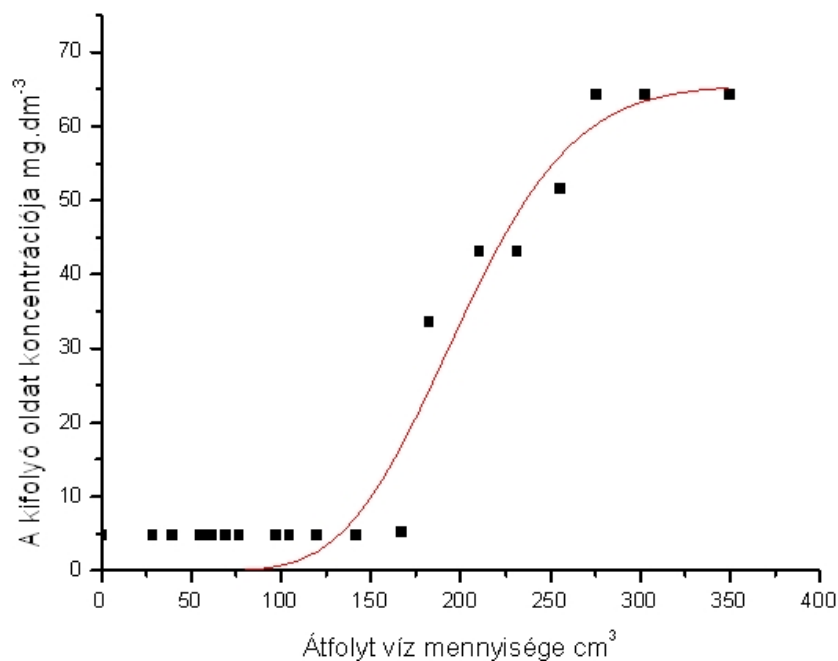
30. ábra

A mért és számított áttörési görbe

3.6. táblázat:

<i>A számított és mért króm-transzport paraméterek(H5)</i>				
<i>Paraméter leírása</i>	<i>Mértékegysége</i>	<i>Paraméter jele</i>	<i>Érték</i>	<i>Hiba</i>
Retardációs faktor	-	R	2,86	0.73
Diszperziós koefficiens	cm ² .s ⁻¹	D	0.0019	0.0015
A vízáramlás sebessége	cm ³ .s ⁻¹	v	0,07	-
A minta vastagsága	cm	z	1.95	-
Bemenő koncentráció	µg.cm ³	c ₀	65,5	4,77
Korreláció	-	R ²	0.95	-

ahol nincs hiba feltüntetve, ott mért paraméterről van szó.



31. ábra

Krómranszport jellemzők meghatározása a H5 mintán, mértek és az illesztett görbe

3.7. táblázat:

<i>A számított és mért króm-transzport paraméterek(H6)</i>				
<i>Paraméter leírása</i>	<i>Mértékegysége</i>	<i>Paraméter jele</i>	<i>Érték</i>	<i>Hiba</i>
Retardációs faktor	-	R	5,84	0.97
Diszperziós koefficiens	cm ² .s ⁻¹	D	0.0011	0.00024
A vízáramlás sebessége	cm ³ .s ⁻¹	v	0,081	-
A minta vastagsága	cm	z	1.95	-
Bemenő koncentráció	µg.cm ³	c ₀	154,0	2,9
Korreláció	-	R ²	0.94	-

ahol nincs hiba feltüntetve, ott mért paraméterről van szó.

A természetben az egyes szennyezők azonban nem önállóan, hanem szerves és szervetlen vegyületekkel együtt fordulnak elő, ezért igen fontos a komponensek kompetitív transzportjának a vizsgálata. Ennek bemutatására a már említett króm formák vizsgálatát mutatjuk be.

A talajban oldható krómszennyezés vizsgálatára egyensúlyi számítási modellt állítottunk fel.

A modellezést az EPA által fejlesztett MINTEQ nevű fizikokémiai egyensúlyok alapján számoló programmal végeztük el. A program adatbázisa a környezetben gyakorlatilag előforduló összes szervetlen anyag oldott és csapadék formáinak egyensúlyi paramétereit tartalmazza. Ezekből számítja iterációval az aktuális feladatban előforduló összetevők paramétereit.

Az adott feladatnál beadott kezdeti paraméterek és engedélyezett redox reakciók a következők voltak:

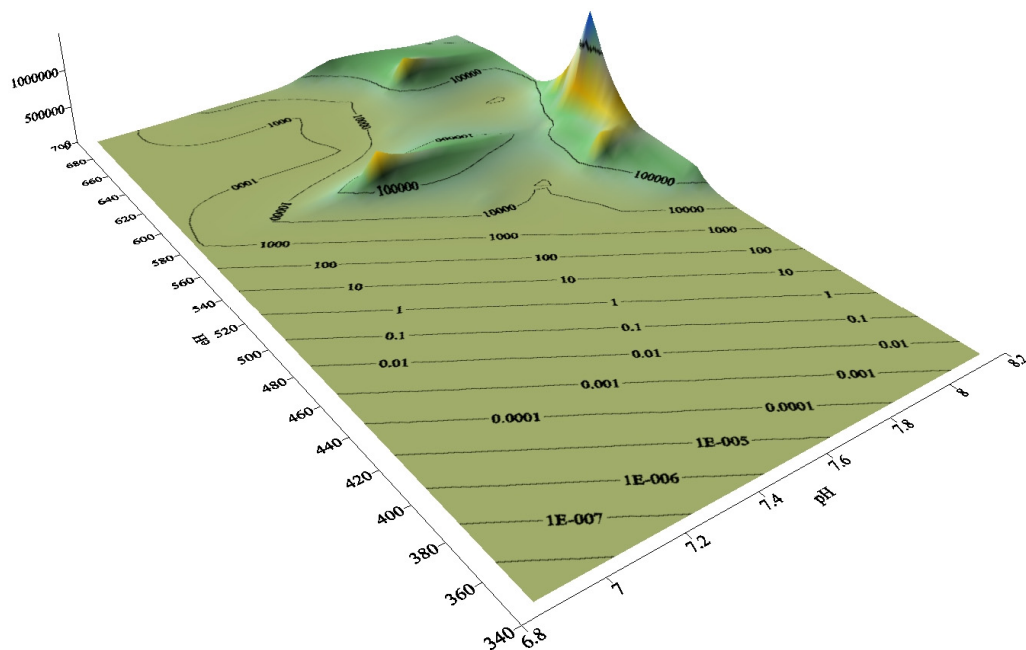
3.7. táblázat:

A MINTEQ programmal végzett számítások kezdeti paraméterei		
Paraméter	Érték	Mértékegység
Ca ²⁺	0.01	mol/l
CO ₂	0.00035	bar
Cr(OH) ₂ ⁺	0.0001	mol/l
CrO ₄ ²⁻	0.0001	mol/l
Eh	430 (360-500)	mV
Fe ²⁺	0.0001	mol/l
Fe ³⁺	0.0001	mol/l
pH	7.4 (6.8-7.7)	-
Mn ²⁺	0.0001	mol/l
Mn ³⁺	0.0001	mol/l
PO ₄ ³⁻	0.0001	mol/l
SO ₄ ²⁻	0.01	mol/l

A MINTEQ programmal végzett számítások során engedélyezett redox reakciók paraméterei		
Paraméter	Érték	Mértékegység
Cr ^{II} /Cr ^{VI}	0.0001	mol/l
Fe ^{II} /Fe ^{III}	0.0001	mol/l
Mn ^{II} /Mn ^{III}	0.0001	mol/l

Az iteráció során a túltelített oldatok kicsapódását engedélyeztük, így a beadott, mértnél nagyobb koncentrációjú oldatok koncentrációja az egyensúlyban mérhető értékekre csökkent.

A modelleket több különböző paraméterkombinációban futtattuk le annak eldöntésére, hogy a pH, illetve az Eh változása milyen hatással van a víz oldható krómtartalmára.



32. ábra

Az egyensúlyi krómkoncentrációk alakulása a pH és az Eh függvényében

3.2.4. A króm kimosódásának modellezése

A számításokat a következő modellel végeztük el (Czinkota, 1994)

$$\frac{V}{w} \cdot \left[\ln c - \frac{A \cdot k \cdot m}{V} \cdot \ln \left(\frac{c}{k \cdot c + 1} \right) + \frac{A \cdot m}{c + 1} \right] = -t + t_0 \quad (3.20.)$$

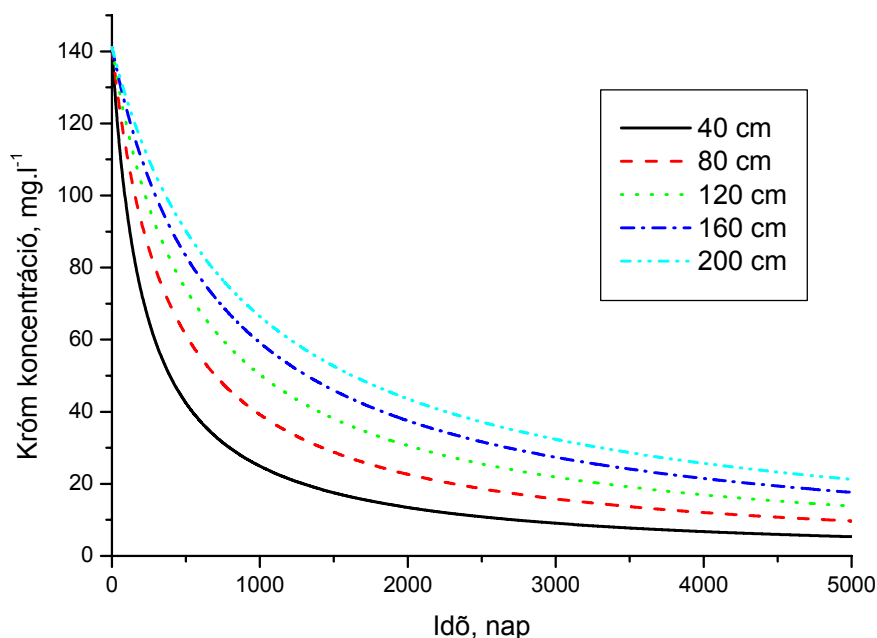
A számítások az iszapszáminta korábban bemutatott, adszorpciós vizsgálatánál megmért, számított illetve becsült paraméterein alapulnak. A számításokat egy dm^2 -es felületű réteget feltételezve végeztük el. A paraméterek jelentése és értékeik a következők:

$V [\text{dm}^3]$	az adszorbensben levő víz térfogata, esetünkben számértékiek megegyezik a rétegvastagság és a 0,4 porozitás szorzatával
$w [\text{dm}^3 \cdot \text{nap}^{-1}]$	a vízáramlás sebessége, kétféle lehetőséget vizsgáltunk, szabad szivárgás esetében $0,086 \text{ dm}^3 \cdot \text{nap}^{-1}$, 10 mm éves beszivárgásnál $0,00274 \text{ dm}^3 \cdot \text{nap}^{-1}$
$A [\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}]$	az adszorpciós izotermából számolt maximális adszorbeálható mennyiség, esetünkben az izoterma első telítési részét vettük figyelembe, $142 \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$
$k [\text{dm}^3 \cdot \text{mg}^{-1}]$	a Langmuir izoterma kötési erősség tényezője, esetünkben az izoterma első telítési részét vettük figyelembe, $0,35 \text{ dm}^3 \cdot \text{mg}^{-1}$
$m [\text{kg}]$	az adszorbens tömege, esetünkben a térfogat és a feltételezett $2.5 \text{ kg} \cdot \text{dm}^{-3}$ sűrűség szorzata
$c [\text{mg} \cdot \text{dm}^{-3}]$	a kifolyó oldat koncentrációja
$t [\text{nap}]$	a kimosódás kezdetétől eltelt idő
$t_0 [\text{nap}]$	integrációs konstans, megegyezik a legnagyobb koncentrációhoz tartozó idővel

Mivel a 3.20 függvény inverzére volna szükség a számításokhoz, és a függvény zárt alakban nem invertálható, ezért egy Delphi programot készítettünk a numerikus invertálásra. Ennek következménye, hogy a kisebb koncentrációtartományokban a függvény képe lépcsős, ami értelemszerűen nem a függvény tulajdonsága, hanem a numerikus közelítés hibája.

A számítások során a görbeseregeket az iszapréteg vastagsága illetve a kezdeti koncentráció változtatásával számítottuk kétféle átfolyási sebességgel. A vizsgált esetekben a koncentráció-idő függvényt ábrázoltuk (33. ábra).

Az ábrán látható a teljes vizsgált idő és koncentráció tartományban az iszaprétegből kifolyó oldat koncentrációja.



33. ábra

Az iszaprétegből kifolyó oldat króm koncentrációja különböző iszapvastagságoknál, 10 mm/év beszívárgást és telített adszorpciós felületet (142 mg/ kg) feltételezve

A sebességfüggés a két különböző áramlási sebességgel készített számítás összehasonlításából állapítható meg. A gyorsabb szivárgás esetén 5000 nap (~13 év) alatt nagymértékben kiürül az adszorbens. Lassabb áramlás esetén még a legvékonyabb réteget feltételezve sem távolítható el az adszorbeált króm jelentős része.

Hasonló tendencia állapítható meg a különböző kezdeti koncentrációkkal indított függvények esetében is.

A rétegvastagság hatásait vizsgálva megállapítható hogy nem lineáris módon, de a vastagság növelésével az adott időponthoz tartozó koncentrációk növekednek. A növekedés jellemzőit egy közepes időtartamnál a 2500. napon vizsgáltam, és azt találtam, hogy ekkor a kifolyt oldat koncentrációja a rétegvastagsággal közel exponenciális kapcsolatban van.

Felhasznált irodalom:

- BARONE, F.S. - ROWE, R.K. - QUIGLEY, R.M. (1990): Laboratory Determination of Chloride Diffusion Coefficient in Intact Shale, Canadian Geotechnical J., Vol.27, pp. 175-184
- BEAR, J. - VERRUIJT, A. (1987): Modelling Groundwater Flow and Pollution, D. Reidel Publ.Co., p. 153-158., 225-284.
- BERNER, R.A. (1971): Principles of Chemical Sedimentology, McGraw - Hill Publ. Co., New York
- BOUWER, H. (1978): Groundwater Hydrology, McGraw-Hill, 480 p.
- BRUCH, J.C. - STREET, R.L. (1967): Two-Dimensional Dispersion, J. Sanit. Eng. Div. Am. Soc. Civ. Eng., 93(SA6):pp. 17-39.
- CHOY, B. - REIBLE, D.D.: Diffusion Models of Environmental Transport, Lewis Publishers. Boca Raton – London – New York - Washington D.C., 1999. pp. 14. és 109-110.

- CZINKOTA, I. (1994): Talajok forróvizes extrakciója, PhD. Doktori értekezés, Gödöllő, kézirat
- CZURDA, K.A. - WAGNER, J-F.(1988):
Verlagerung und Festlegung von Schwermetallen in tonigen Barrieregesteinen, Tone in der Umwelttechnik, AGK Schriftenreihe 4, pp. 225-247.
- CZURDA, K.A.- WAGNER, J-F. (1991):
Migration and Retention Phenomena of Radionuclides in Clay Barrier Systems, Applied Clay Science, 6, pp. 195-214.
- CSANÁDY, G.T. (1973): Turbulent Diffusion in the Environment, D.Reidel Publ. Co. Dordrecht, Boston, 248.p.
- DRAGUN, J. (1988): The Soil Chemistry of Hazardous Materials, Hazardous Materials Research Institute, Silver Springs, USA
- DREVER, J.I. (1982): The Geochemistry of Natural Waters, Prentice-Halls, Englewood Cliff
- EGGLOFFSTEIN, TH. - BURKHARDT, G. - MAINKA, A. (1996): Geotechnische Aspekte bei der Standortsuche und Standorterkundung für Abfalldeponien, MBS Seminar, AGK Schriftenreihe 44, pp. 4-1 - 4-63.
- FILEP GY. (1988): Talajkémia, Akadémiai Kiadó, Budapest, pp. 48-49., pp. 118-120.
- FREEZE, R.A. – Cherry, J.A. (1979): Groundwater, Prentice-Hall, Englewood Cliffs
- FRIND, E.O. (1982): The Principal Direction Technique: A New Approach to Groundwater Contaminant Transport Modelling, Proc. of 4th Intl. Conf. on Finite Elements in Water Resources, Hannover, Springer Verlag, pp. 13/25-13/42
- GILLHAM, R.W. - ROBIN, M.J.L. - DYTNYSHY, N.D.J. - JOHNSTON, H.M. (1984): Diffusion of Nonreactive and Reactive Solutes through Fine Grained Barrier-Materials, Canadian Geotechnical J. Vol.21(3). pp.541-550.
- GUPTA, S.K. - PANDEY, R.N. (1980): The Leaching Efficiency Criterion and its Evaluation during Reclamation of Saline Soils Proc. of Int'l. Symp. on Salt Affected Soils, Karnal (India) pp.300-306.
- HALÁSZ B (1987): Gyenge oldatok advetív transzportjának számítása sokszintes felszín alatti tárolókban, Hidrológiai Közlöny, 67.évf. 5-6. pp.283-287.
- ISTOK, J. (1989): Groundwater Modeling by the Finite Element Method, American Geophysical Union, Water Resources Monograph Vol.13.
- KEMPER, W.D. - MAASLAND, D.E.L. - PORTER, L.K.(1964): Mobility of Water Adjacent to Mineral Surfaces, Proc. of Soil Sciences Society of America Vol. 28(2), pp.164-167.
- KINZELBACH, W. (1986): Groundwater Modelling (An Introduction with Sample Programs in BASIC), Elsevier
- KOVÁCS B.: Szennyezőanyag-terjedési számítások környezetvédelmi alkalmazásai, 1998, kézirat, PhD értekezés
- KÖNIG, CH. (1993): Numerische Modellierung von Grundwasserströmungs- und Stofftransportvorgängen am Niederrhein, Mitteilungen Inst. für Bodenmechanik und Grundbau, (Hrsg.: SEMPRICH, S.), TU Graz, Mitteilungsheft 10, pp. 178_192.
- KREMPER R. (1998):A diszperziós koefficiens számítására alkalmas módszerek összehasonlítása, Kézirat
- LEGE, T. - KOLDITZ, O. - ZIELKE, W. (1996) Strömungs- und Transportmodellierung, Springer Verlag, Berlin
- MABEY, W. - MILL, T (1978): Critical review of Hydrolysis of organic compounds in Water under Environmental Conditions, Jour. Phys. Chem. Ref. data 17, No 2: pp. 383-415.
- NYE, P.H. (1979): Diffusion of Ions and Uncharged Solutes in Soils and Soil Clays, Advances in Agronomy, Vol. 31, pp. 225-272.
- OGATA, A. (1970): Theory of Dispersion in Granular Medium, US Geological Survey Professional Paper, 411-I.,US. Government Printing Office, Washington
- OGATA, A. - BANKS, R.B. (1961): A Solution of Differential Equation of Longitudinal Dispersion in Porous Media, US Geological Survey Professional Paper, 411-A., US. Government Printing Office, Washington
- PERKINS, T.K. - JOHNSTON, D.C. (1963): Review of Diffusion and Dispersion in Porous Media, Society of Petroleum Engineering J., Vol.3., pp. 70-84.
- PONGRÁCZ A.(1981): A szennyezőanyagok terjedése talajvízben, Vízügyi Közlemények, 1981/4. pp. 612-618.
- PORTER, L.K. - KEMPER, W.D. - JACKSON, R.D. - STEWART, B.A. (1960): Chloride Diffusion in Soils as Influenced by Moisture Content, Proc. of Soil Sciences Society of America, Vol. 24(6), pp.400-403.

- QUIGLEY, R. M. - YANFUL, E.K. - FERNANDEZ, F. (1987): Ion Transfer by Diffusion through Clayey Barriers, Proc. Geotechnical Practice for Waste Disposal, American Society of Civil Engineers, Geotechnical Special Publications 13. pp. 137-158,
- REDDEL, D.L. - SUNADA, D.K. (1970): Numerical Simulation of Dispersion in Groundwater Aquifers, Colorado State University, Hydrology Paper, 41, p 79.
- ROWE, R.K. (1987): Pollutant Transport Through Barriers Proc. ASCE Conf. on Geotechnical Practice for Waste Disposal, pp. 159-181.
- SAUTY, J.P. (1980): An Analysis of Hydrodispersive Transfer in Aquifers, Water Resources Research, 16(1) pp.145-158.
- SCHEIDEGGER, A.E. (1957): On the Theory of Flow of Miscible Phases in Porous Media, J. of Geophysical Resources, Vol. 66(10), pp. 3273-3278.
- SHACKELFORD, Ch.D. (1990): Transit Time Design of Earthen Barriers, Engineering Geology, 29:79
- SHACKELFORD, Ch.D. - DANIEL, D.E. (1991): Diffusion in Saturated Soil I.: Background, J. of Geotechnical Engineering, Vol.117. pp.467-484.
- SHAW, D.J. (1986): Bevezetés a kolloid és felületi kémiába, Műszaki Könyvkiadó, Budapest
- SKAGIUS, K. - NERETNIEKS, I. (1986): Porosities and Diffusivities of Some Non-Sorbing Species in Crystalline Rocks, Water Resources Research, 22: pp. 389-398
- SZABÓ I. - KOVÁCS B. - Czinkota I. - Takács S. (2001):
Egy fúrási iszapptároló környezetében lévő cink eredetének vizsgálata, Szakvélemény, Kézirat pp.191-214.
- SZÉKELY F. (1986): Felszín alatti vizek konvektív kémiai tömegtranszportjának numerikus modellezése Hidrológiai Közlöny, 66.évf.4-5. pp.255-259.
- TAMÁS J. – KOVÁCS B. – BÍRÓ T. (2002): Vízkészlet – Modellezés, egyetemi jegyzet, ISBN963 472 657 7, Debreceni Egyetem, p. 200.
- UJFALUDI L. (1985): Inhomogén szemszerkezetű talajok diszperziós tulajdonságainak vizsgálata, Vízügyi Közlemények , LXVII. évf. 1985/3., pp. 479-487.
- van GENUCHTEN, M-TH. - WIERENGA, P.J. (1986): Solute Dispersion and Retardation Factors In: Klute(Ed.) Methods of Soil Analysis, Part 1.
- WAGNER, J-F. (1992): Verlagerung und Festlegung von Schwermetallen in tonigen Deponieabdichtungen. Ein Vergleich von Labor und Geländestudien, AGK Schriftenreihe 22., Karlsruhe
- WADDEN, M.M. - KATSUBE, T.J. (1982): Radionuclide Diffusion Rates in Igneous Crystalline Rocks, Chemical Geology, 36,
- WATER SCIENCE AND TECHNOLOGY BOARD OF THE NATIONAL RESEARCH COUNCIL (1990): Ground Water Models, Scientific and Regulatory Applications, National Academy Press, Washington D.C., p.303.

A KUTATÁSSAL KAPCSOLATOS PUBLIKÁCIÓK JEGYZÉKE:

KÖNYVEK:

- KOVÁCS B.: Hidrodinamikai és transzportmodellezés Processing MODFLOW környezetben I. 2004, Miskolci Egyetem – Szegedi Tudományegyetem – GÁMA-GEO, p. 160., ISBN 963 661 637 X
- KOVÁCS B. – SZANYI J.: Hidrodinamikai és transzportmodellezés Processing MODFLOW környezetben II, 2004, Miskolci Egyetem – Szegedi Tudományegyetem – GÁMA-GEO, p. 160., ISBN 963 661 638 8

KÖNYVRÉSZLETEK:

- KOVÁCS B.: A víz áramlásának törvényszerűségei, a víz mozgását befolyásoló tényezők, pp. 91-105: in Tamás J. - Kovács B. - Bíró T.: Vízkészlet-modellezés, University of Debrecen, Debrecen. 2002. ISBN 963 472 657 7.
- KOVÁCS B.: A szivárgás alapegyenletének megoldásai, pp. 106-112: in Tamás J. - Kovács B. - Bíró T.: Vízkészlet-modellezés, University of Debrecen, Debrecen. 2002. ISBN 963 472 657 7.
- KOVÁCS B.: A transzportegyenlet ismert megoldási módjai, pp. 113-136: in Tamás J. - Kovács B. - Bíró T.: Vízkészlet-modellezés, University of Debrecen, Debrecen. 2002. ISBN 963 472 657 7.
- KOVÁCS B.: A modellszámítások adatigénye, az adatrendszer hibái, pp. 137-149: in Tamás J. - Kovács B. - Bíró T.: Vízkészlet-modellezés, University of Debrecen, Debrecen. 2002. ISBN 963 472 657 7.
- KOVÁCS B.: A számítási eredmények érzékenysége a nem reprezentatív adatokra, pp. 150-159: in Tamás J. - Kovács B. - Bíró T.: Vízkészlet-modellezés, University of Debrecen, Debrecen. 2002. ISBN 963 472 657 7.
- KOVÁCS B.: A modellek kalibrációja, pp. 160-173: in Tamás J. - Kovács B. - Bíró T.: Vízkészlet-modellezés, University of Debrecen, Debrecen. 2002. ISBN 963 472 657 7.
- KOVÁCS B.: A hidrodinamikai és transzportmodellezés elmélete in: Filep Gy. - Kovács B. - Madarász T. - Lakatos J.-Szabó I.: Szennyezett területek kármentesítése, book, University of Miskolc Publishers, pp. 309-410., 2002
- KOVÁCS B.: Gyakorlati hidrodinamikai és transzportmodellezés in: Filep Gy. - Kovács B. - Madarász T. - Lakatos J.-Szabó I.: Szennyezett területek kármentesítése, book, University of Miskolc Publishers, pp. 410-475., 2002
- KOVÁCS B. – SZABÓ I. – CZINKOTA I.: Environmental Impact of a Drilling Mud Deposit, 2002, in: Lakatos I. ed.: Focus on Remaining Oil and Gas Reserves, Akadémiai Kiadó, Budapest pp. 339-346.
- KOVÁCS B.: Szennyeződés-terjedés modellezése, in Szoboszlai S. - Kriszt B.: Környezeti elemek védelme I., Szent István Egyetem, Gödöllő. 2006 pp. 127-154. (In press)

CIKKEK ÉS EGYÉB PUBLIKÁCIÓK:

- SZACSURI G.: A cink terjedési jellemzőinek laboratóriumi vizsgálata; Doktoranduszok fóruma, Miskolc, 2001
- NEMES A. - CZINKOTA I. - CZINKOTA GY. - TOLNER L. - KOVÁCS B.: Outline of an automated System for Quasi-Continuous Measurement of Particle Size Distribution, Agrokémia és Talajtan, 51(2002)1-2, pp. 37-46.
- KOVÁCS B. - SZACSURI G. - CZINKOTA I. - SZABÓ I. - Czanik P.: Environmental Geotechnical Aspects of Remediation of Drilling Mud Deposits, Proc. of the 12th Danube-European Conference on Soil Mechanics and Geotechnical Engineering, Passau, 2002
- KOVÁCS B. - SZABÓ I. - CZINKOTA I.: Cink szennyeződés eredetének vizsgálata, in: DATE ATC: Talaj és Környezet tudományos ülés Filep Gy. professzor 70. születésnapja alkalmából, szerk: Kátai J és Jávora A., pp. 206-216.
- KOVÁCS B. - SZABÓ I. - CZINKOTA I.: Environmental Impact of a Drilling Mud Deposit, Proc. of the DepoTECH'2002 Conference, Leoben, 2002, A.A. Balkema pp. 437-446.

- CZINKOTA, I., NEMES A., CZINKOTA GY., TOLNER L., KOVÁCS B. AND PACHEPSKY YA.A. (2002): An automated system for the quasi-continuous measurement of the particle-size distribution. ASA-CSSA-SSSA Annual Meetings, Indianapolis, IN, USA, 10-14 November, 2002
- CZINKOTA I., ISSA I, RÉTHÁTI G, KOVÁCS B: Determination of the behavior and the transport parameters of chromium in soil-water systems, közlésre elfogadva, Agrokémia és Talajtan
- CZINKOTA I. - KOVÁCS B. - CZANIK P. - SZACSURI GÁBOR: Investigation of heavy metal-M+ processes 20. EUROPAI "SEGH" Konferencia, Debrecen, 2002.
- CZINKOTA I, FÖLDÉNYI R, LENGYEL ZS, MARTON A : Adsorption of propisochlor of soils and components equation for multi-step isotherms,. Chemosphere 48(2002), pp. 725-731, IF 1,255
- KONDA L, CZINKOTA I, FÜLEKY GY, MOROVJÁN GY.: Modeling of Single-Step and Multistep Adsorption Isotherms of Organic Pesticides on Soil, Agricultural and Food Chemistry, 50. (2002) pp. 7326-7331 IF. 1,168
- FOLDENYI R, CZINKOTA I, ERTLÍ T : Presentation of multi-step isotherms formed at the adsorption of herbicides 2003 Progress in Colloid and Polymer Science, (2004) 125: 117–120 IF 1,269
- SZACSURI G. CZINKOTA GY. CZANIK P: A new automated method for the quasi-continuous determination of particle-size distribution; microCAD 2004. Nemzetközi Tudományos Konferencia, Miskolc, 2004.
- KOVÁCS B - SZACSURI G. CZANIK P: ASTA – Új megoldás a finom szemcsefrakciók méreteloszlásának meghatározására; poszter prezentáció, Magyarhoni Földtani Társulat Vándorgyűlése, Egerszalók, 2004
- CZINKOTA I., ISSA I, RÉTHÁTI G, KOVÁCS B: Determination of the behavior and the transport parameters of chromium in soil-water systems, közlésre elfogadva, 2006, Agrokémia és Talajtan
- CZINKOTA I., ISSA I, RÉTHÁTI G, KOVÁCS B: Determination of the behavior and the transport parameters of chromium in soil-water systems, Proc. of WCSS'2006 Conf. Philadelphia, Pennsylvania, (in Press)